

LIVRO DE RESUMOS



SEMANA INTEGRADA DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**Semana Integrada do Instituto
de Física de São Carlos
SIFSC 4**

Livro de Resumos

**São Carlos
IFSC
2014**

Universidade de São Paulo

Reitor Marco Antonio Zago
Vice-Reitor Vahan Agopyan

Instituto de Física de São Carlos

Diretor Tito José Bonagamba
Vice-Diretor Osvaldo Novaes de Oliveira Junior

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Maria Cristina Cavarette Dziabas
Maria Neusa de Aguiar Azevedo
Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(4. : 06 out. - 09 out. : 2014: São Carlos, SP.)
Livro de resumos / Organizado por Raul R.
Prado [et al]. São Carlos: IFSC, 2014.
429 p.

Texto em português.

1. Física. I. Prado, R. R. II. Santos, Edmilson R. dos
III. Rêgo, C. R. C. IV. Zawadzki, K. V. Título.

CDD 530

ISBN - 978-85-61958-09-1



Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 4

Coordenadores

Prof. Dr. Tito José Bonagamba

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Ana Laura de Lima

André Henrique Senhorino Teschke

Celso Ricardo Caldeira Rêgo

Edmilson Roque dos Santos

Emérita Mendoza Regifo

Érika Chang de Azevedo

Krissia de Zawadzki

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Graziele Izalina Vasconcelos Bento

Guilherme Eduardo de Souza

Lucas Henrique Francisco

Marcelo Saito Nogueira

Milena Menezes Carvalho

Murilo Leão Pereira

Natália Karla Bellini

Nicolau Barbosa Palma Filho

Paola Cristina Barbosa

Pedro Ivo Silva Batista

Raul Ribeiro Prado

Vicente Silva Mattos

Victor Silva Tona de Abranches

Victor Rabesquine

Carta de apresentação

A IV Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos (SIFSC 4) mantém seu caráter inter e multidisciplinar, com programação científica de alto nível idealizada de forma a atender aos alunos de graduação em Física, Física Computacional e Ciências Físicas e Biomoleculares e alunos de pós-graduação do IFSC-USP.

A parceria que o IFSC-USP tem com a setor privado é destacada pela apresentação de vários produtos, desenvolvidos na maioria das vezes em colaborações entre o instituto e empresas de alta tecnologia. Nesse sentido, muitas empresas são convidadas a expor produtos e ministrar palestras durante a SIFSC 4.

Além da agenda científica, o evento também conta com uma programação cultural intensa e diversificada, oferecendo aos alunos do IFSC-USP a oportunidade de revelarem suas habilidades artísticas.

A apresentação dos trabalhos científicos desenvolvidos no IFSC-USP na forma de pôster nos Workshops de Iniciação Científica e de Pós-Graduação ocorrerá de forma unificada no último dia do evento, proporcionando aos participantes um ambiente para discussão científica e para integração de alunos, professores e pesquisadores. Os trabalhos científicos de destaque receberão o Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas, criado em 2011 por iniciativa da comissão organizadora e apoio da diretoria para prestigiar trabalhos científicos desenvolvidos no IFSC-USP, que chega à sua quarta edição com mais de 100 inscritos.

A SIFSC 4 é um evento organizado por alunos de graduação e pós-graduação do IFSC-USP, que dividem tarefas que incluem a escolha e o convite de palestrantes, auxílio na captação de recursos, divulgação, coordenação de atividades e diálogo com servidores técnico-administrativos. Neste ano, esperam-se cerca de 580 participantes entre alunos, avaliadores, palestrantes e representantes de empresas.

A Comissão Organizadora agradece o total apoio da diretoria do IFSC-USP, às Comissões de Graduação e Pós-Graduação. Agradece ainda, ao apoio dos servidores da Biblioteca, aos técnico-administrativos, bem como aos palestrantes, empresas convidadas, avaliadores e à comunidade do IFSC-USP pela participação no evento.

Comissão Organizadora da SIFSC 4



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Estudo da incorporação de corantes orgânicos catiônicos em matrizes mesoporosas sódio-aluminossilicato por troca iônica ALMEIDA FILHO, F. P.; FERRARI, C. R.; BOTELHO, M. B. S.; CAMARGO, A. S. S.	31
IC2 - Clonagem e expressão do gene codificante da proteína do capsídeo de leishmaniavirus LRV1-4 BARBOSA, P. C.; AZEVEDO, E. C.; THIEMANN, O. H.	32
IC3 - Implementação de um modulador de cristal líquido de baixo custo para a técnica de varredura-z heterodina BERNARDI, M. R.; MISOGUTI, L.	33
IC4 - Structural and molecular studies of fosfopanteteinil transferase enzyme from Xanthomonas albilineans BERTOLINO, D. E.; LIMA, G. M. A.; GUIDO, R. V. C.	35
IC5 - A density functional theory investigation of the structural and electronic properties of quaternary semiconductors BESSE, R.; SABINO, F. P.; DA SILVA, J. L. F.	36
IC6 - Characterization of the protein-protein interactions of spliceosomal U5-200K in Trypanosoma brucei. BORALLI, C. M. S.; ROSA e SILVA, I.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.	38
IC7 - Biosensor development for hormone melatonin detection BRAMORSKI, C. B.; BRAZACA, L. C.; MARKUS, R. P.; ZUCOLOTTO, V.	39
IC8 - Jornal Digital: difusão do processo do consumo e tratamento da água por alunos do ensino fundamental II CAMPELO, R.; RADICCHI, G. R.	40
IC9 - Prospecção de linhagens bacterianas produtoras de biossurfactantes a partir de amostras de óleo de um reservatório off-shore brasileiro CARVALHO, K. F.; CORREA, T.; BOSSOLAN, N. R. S.	41

IC10 - Statistical features of neuronal avalanches and local field potentials CARVALHO, M. M.; MOSQUEIRO, T. S.; MAIA, L. P.	42
IC11 - Introdução à teoria de grupos e suas aplicações em física CONSOLE, F. C. C.; BERNARDES, E. S.	43
IC12 - PEER INSTRUCTION: uma metodologia ativa de aprendizagem para abordar o efeito fotoelétrico no Ensino Médio. CORREIA, T. F. de A.; ZAGO, L.; BARROS, M. V.; BARROS, M. A.	44
IC13 - Caracterização no estado sólido de fármacos antidepressivos: planejamento de novas formas cristalinas COSTALONGA, M.; ELLENA, J. A.; CARVALHO JUNIOR, P. S.	46
IC14 - Avaliação do fotoenvelhecimento de pele por espectroscopia de fluorescência D'ALMEIDA, C. P.; CAMPOS, C. P.; PRATAVIEIRA, S.	47
IC15 - Clonagem e expressão da proteína Meg15 de Schistosoma Mansoni FELIZATTI, A. P.; ORCIA, D.; DE MARCO, R.	48
IC16 - Análise da especificidade da interação entre o fator de alongação específico para selenocisteínas (SelB) com mutantes do tRNASec de Escherichia coli FERNANDES, A. F.; SERRÃO, V. H. B.; MANZINE, L. R.; THIEMANN, O. H.	50
IC17 - Desenvolvimento de recursos multimídia utilizando a água como tema gerador de projeto multidisciplinar no ensino fundamental II FERNANDES, L. G.; COLNAGO, N. A.S.; MASCARENHAS, Y. P.; CORDEIRO, A. M.	51
IC18 - Optimization of the CTA array LANG, R. G.; SOUZA FILHO, L. V.	52
IC19 - Síntese e caracterização de nanopartículas metálicas revestidas com sílica e funcionalizadas com fluoróforos para aplicação em medicina LEITE, A. E. T.; ZUCOLOTTI, V.; MARANGONI, V. S.	54
IC20 - A nanotecnologia representada por meio de desenhos: um estudo com alunos do ensino fundamental LICIO, J. G.; LOURENÇO, A. B.	55
IC21 - Development of a processing tool for magnetic resonance spectroscopy data using Krilov basis method diagonalization LIMA, T. S.; SILVA, D. M. D. D.; PAIVA, F. F.	57
IC22 - Álgebra linear e aplicações á física: geradores de dinâmica MARTINELLI, T.; VEIGA, P. A. F.	58

IC23 - Produção de nanocristais semicondutores core-shell de CdSe/ZnS baseados em quantum dots MARTINS, N. Z.; HERNANDES, A. C.; BERNARDI, M. I. B.	60
IC24 - Estudos estruturais e funcionais de hidrolases de glicosídeos das famílias 18 e 105, com potencial na despolimerização da biomassa lignocelulósica MENDONÇA, D. C.; BERNARDES, A.; MUNIZ, J. R. C.	61
IC25 - Evolução temporal de uma quase-partícula MIKUNI, V. M.; OLIVEIRA, L. N. de	62
IC26 - Microscopia óptica com sistema emissor de luz à base de LED-RGB NAVASCUES, F. F.; WEIS, P. T.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.	63
IC27 - Processing of graphene oxide and conjugated polymers for wastewater trace metal treatment NOGUEIRA, V. H. R.; SANTOS, F. A.; NOGUEIRA, P. F. M.; ZUCOLOTTO, V.	64
IC28 - Study about acid-alkaline transition meta-hemoglobin AMAZON'S-TURTLE (Podocnemis Expansa Schweigger) (Testudines, Podocnemididae) using spectroscopic methods OLIANI, F. H.; NASCIMENTO, O. R.	65
IC29 - Analysis of the effect of mutations in SEPT3 on SEPT3-SEPT7 interaction PALMA FILHO, N. B.; MACEDO, J. N. A.; ARAÚJO, A. P. U.	66
IC30 - Propriedades elétricas de materiais híbridos com alta transparência derivados de GPTS:TEOS/PEDOT:PSS preparados via processo sol-gel QUADROS, M. H.; GOZZI, G.; DONATTI, D. A.; VICENTE, F. S.	67
IC31 - Luz e espelhos: uso de mapas conceituais no estudo de óptica para alunos do ensino médio RIBEIRO, A. S. L.; HERNANDES, A. C.; LOURENÇO, A. B.	68
IC32 - Structural correlation between synthetic derivatives of riparins with biological activity against Schistosoma mansoni RUBIO, T. I.; MASCARENHAS, Y. P.; MAFUD, A. C.	69
IC33 - Estudos numéricos sobre o oscilador harmônico clássico e quântico SANTI, N. S. M.; CUCCHIERI, A.	71
IC34 - Explosive synchronization: analysis of the frequency influence in the discontinuous phase transition SANTOS, E. R.; RODRIGUES, F. A.	72

IC35 - Dinâmica de operadores de dois corpos em cadeias de spin exatamente solúveis SCHOSSLER, M. O.; PEREIRA, R. G.	73
IC36 - Caracterização das interações moleculares entre proteínas da via de síntese de selenocisteínas SCORTECCI, J. F.; SERRAO, V. H. B.; SILVA, I. R.; da SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.	74
IC37 - Caracterização nos estados sólidos de fármacos antidepressivos: planejamento de novas formas cristalinas de fluoxetina e sertralina SOLER, T. de O.; ELLENA, J. A.	75
IC38 - Biophysical studies of spliceosomal protein U5-200K in Trypanosoma brucei SOUZA, G. E.; ROSA e SILVA, I.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.	76
IC39 - Development of a high resolution imaging system for a turbulent Bose-Einstein condensate TONIN, Y. R.; HENN, E. A. L.	77
IC40 - Análise da distribuição de íons ao redor de proteínas globulares em solução eletrolítica usando técnicas de dinâmica molecular VISCARDI, L. A. M.; CÂMARA, A. S.; HORJALES, E.	79
IC41 - Avaliação da inativação fotodinâmica sobre o crescimento in vitro de Staphylococcus aureus, E.coli e Candida albicans WEIS, P. T.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.	81
IC42 - A new detection approach for the chronic kidney disease in initial stages using synthetic biology ZAMPRONIO, D. K.; GUTIERREZ, R. F.; ARAÚJO, A. P. U.; NUNES, F.; MAIZEL, A. S.; MOREIRA, B. C.; ONO B.; BRAMORSKI, C.; SANTOS JR, C. D.; VIEIRA, D.; LINDENBERG, F. M.; TANOUYE, F. T.; KUNDLATSCH, G. E.; SILVA, I. R.; MORAES, J. B.; BRAZACA, L. C.; RIBOVSKI, L.; ZANE FILHO, L.; TREVISAN, M.; GONÇALVES, M. P.; FREITAS, M. G.; HERINGER, O.; PESSOA, P. H. M.; MEDEIROS, P.; WU, R.; JESUS, T. C. L.; NOGUEIRA, V. H. R.; ZANELLI, C. F.	82
IC43 - Análise do efeito da fotoestimulação na circulação usando o modelo de membrana corioalantóica ZANGIROLAMI, A. C.; BUZZÁ, H. H.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.	84

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Otimização de estratégias de pré-tratamento de bagaço de cana-de-açúcar na produção de etanol de segunda geração via hidrólise enzimática. ESPIRITO SANTO, M. C.; NOGUEIRA, A. R. S.; CURVELO, A. A. S.; GUIMARÃES, F. E. G.; AZEVEDO, E. R.; POLIKARPOV, I.	86
PG2 - Plant physiology: from molecular to cellular networks ALMEIDA FILHO, H. A.; MARTINEZ, O. B.	88
PG3 - Structural and surface morphology modification in hydrogenated amorphous silicon thin films induced by femtosecond pulses ALMEIDA, G. F. B.; CARDOSO, M. R.; AOKI, P. H. B.; LIMA JUNIOR, J. J. D.; COSTA, L. da F.; RODRIGUES, C. A.; CONSTANTINO, C. J. L.; MENDONÇA, C. R.	89
PG4 - Recobrimento biológico de nanossuperfícies utilizando modelagem computacional AMARANTE, A. M.; OLIVEIRA, G. S.; IERICH, J. C. M.; FREITAS, L. C. G.; FRANCA, E. F.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; LEITE, F. L.	90
PG5 - Numerical model for adjustment of experimental curves characteristics of bulk organicsolar cell heterojunction AMORIM, D. R. .B.; FARIA, R. M.	92
PG6 - Avaliação do dano tecidual causado pela terapia fotodinâmica associada à radiação ionizante ANDRADE, C. T.; PIRES, L.; PAVONI, J. F.; BAFFA FILHO, O.; OLIVEIRA, H. M.; TIRAPELLI, L. F.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.	93
PG7 - Desenvolvimento de técnicas de processamento de dados e simulações aplicado ao estudo de meios porosos por ressonância magnética nuclear ANDREETA, M. B.; BONAGAMBA, T. J.	95
PG8 - A matematização da eletricidade por Aepinus no século XVIII ARAÚJO, G. D.; SILVA, C. C.	96
PG9 - Estudos estruturais por espalhamento a baixo ângulo (SAXS) e cristalografia de raios-X de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios ARAUJO, E. A.; POLIKARPOV, I.	97

PG10 - Propriedades estruturais e ópticas em polímeros emissores de luz induzidas por interfaces sondadas por filmes ultrafinos e espectroscopia de molécula isolada ARAUJO, F. L.; GUIMARAES, F. E. G.	99
PG11 - Geração de estados de Fock via localização de Anderson ARAUJO, H. S.; MOUSSA, M. H. Y.	101
PG12 - Prospecção de linhagens bacterianas produtoras de biosurfactante a partir de rocha de um reservatório offshore de petróleo ARGENTIN, M. N.; CORRÊA, T.; BOSSOLAN, N. R. S.	102
PG13 - Informação quântica via ressonância quadrupolar nuclear ASCONA, C. R.; BONAGAMBA, T. J.; CARVALHO NETO, J. T.	104
PG14 - Simulação de alto desempenho aplicada a métodos numéricos de alta ordem em dinâmica de fluidos computacional AURICHIO, V. H.; CUCCHIERI, A.; OLIVEIRA, M. L. B.	105
PG15 - Caracterização molecular e estrutural do vírus de Leishmania LRV1-4 AZEVEDO, E. C.; CASSAGO, A.; PORTUGAL, R. V.; THIEMANN, O. H.	106
PG16 - Avaliando a estrutura de redes complexas com caminhadas aleatórias BAGNATO, G. G.; TRAVIESO, G.	107
PG17 - Investigation of quantum turbulence in trapped cold atoms of ^{87}Rb BAHRAMI, A.; TAVARES, P.; FRITSCH, A.; TONIN, Y.; TELLES, G.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S.	109
PG18 - Nanofibras polimericas biodegradaveis funcionalizadas para aplicações em nanomedicina e nanotoxicologia BALLESTEROS, C. A. S.; ZUCOLOTTO, V.	111
PG19 - Study of third-harmonic generation at interfaces affected by other linear and nonlinear processes BARBANO, E. C.; HARRINGTON, K.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L.	112
PG20 - Um novo método de RMN no domínio do tempo para identificação e caracterização de relaxações moleculares em sistemas orgânicos BARBOSA, U.; DEAZEVEDO, E. R.	113
PG21 - Cultivo e isolamento de bactérias anaeróbias termofílicas de reservatório de petróleo, com interesse para espécies da ordem Thermotogales. BARDIVIESSO, L. G.; BOSSOLAN, N. R. S.	115

PG22 - Dynamics of a bosonic Josephson junction subject to an artificial non-abelian gauge field BARRETO, D. L.; SANTOS, F. E. A.; BAGNATO, V. S.	117
PG23 - Efeito da adição de dopantes e da rota de síntese nas propriedades do composto CaTiO_3 BARROS, K. L. P. de; MASTELARO, V. R.	118
PG24 - Cálculo dos parâmetros $k.p$ para semicondutores Ga-V na forma zinc blende . BASTOS, C. M. O.; FARIA JUNIOR, P. E.; CAMPOS, T.; SIPAHI, G. M.	119
PG25 - Sequências de ensino-aprendizagem baseadas na abordagem investigativa e uso de experimentos históricos em sala de aula BATISTA, R. F. M.; SILVA, C. C.	120
PG26 - Studies of Naegleria gruberi Selenophosphate Synthetase (SPS) involved in eukaryotes selenocysteine insertion machinery BELLINI, N. K.; SILVA, I. R.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.	122
PG27 - Engenharia de reservatórios térmicos na teoria do laser BERGOC, I. C.; MOUSSA, M. H. Y.	124
PG28 - Information on crystallinity index in cellulose of sugarcane biomass submitted to acid/alkaline pretreatment and enzymatic treatment via new model data analyze using solid-state NMR BERNARDINELLI, O. D.; LIMA, M. A.; REZENDE, C. A.; POLIKARPOV, I.; AZEVEDO, E. R. ...	125
PG29 - O limite termodinâmico do modelo de Axelrod unidimensional de dois estados BIRAL, E. J. P.; FONTANARI, J. F.	127
PG30 - Não-linearidade e emaranhamento quântico em sistemas optomecânicos BRAGA, R.; MOUSSA, M. H. Y.	129
PG31 - Processing and characterization of plasmonic nanostructures BRATIFICH, R.; MAREGA JUNIOR, E.	130
PG32 - Desenvolvimento de um sistema unilateral de RMN para aplicação em meios porosos BRAZ, D. C.; VIDOTO, E. L. G.; AMORIM, A. D. F.; BONAGAMBA, T. J.	131
PG33 - Nanostructured biosensors for adiponectin hormone detection and investigation on its correlation with diabetes Mellitus type BRAZACA, L. C.; JANEGITZ, B. C.; BERNARDI, J. C.; ZUCOLOTTO, V.	133

PG34 - Estudos de biologia molecular estrutural da enzima FcID de Xanthomonas albilineans: alvo biológico para a descoberta de novos agroquímicos BUENO, R. V.; MALUF, F. V.; GUIDO, R. V. C.	134
PG35 - Análise por fluorescência de diferentes fotossensibilizadores no modelo tumoral de membrana corioalantóica para aplicação da terapia fotodinâmica BUZZÁ, H. H.; ZANGIROLAMI, A. C.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.	136
PG36 - Dispositivo fotovoltaico de heterojunção utilizando nanofios de GaAs/AlGaAs/GaAs com polímero PPV CAFACE, R. A.; GUIMARÃES, F. E. G.	138
PG37 - Study and development of spherical harmonics based methods for ligand similarity analysis CAIRES, F. R.; MONTALVÃO, R. W.	139
PG38 - Decifrando a estrutura da interação regulador-DNA CAMÂRA, A. S.; DE GROOTE, M. C. R.; REBOREDO, E. H.	140
PG39 - Photodynamic therapy associated with phototherapy for the treatment of photoaged mice skin CAMPOS, C. P.; JORGE, A. E. S.; KURACHI, C.	142
PG40 - Magnetic field effects and nodal ground states in InP nanowires CAMPOS, T.; FARIA JUNIOR, P. E.; SIPAHI, G. M.; ZUTIC, I.	144
PG41 - Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda CANDIDO, D. R.; EGUES, J. C.	145
PG42 - Construction of a global map of protein-protein interactions in c-di-GMP signalling pathways of Pseudomonas aeruginosa CARDOSO, A. R.; NAVARRO, M. V. A. S.; CAMILO, C. M.	146
PG43 - Estudo do modelo estocástico PARPM CARVAJAL JARA, D. A.; ALCARAZ, F. C.	148
PG44 - Avaliação do potencial de sequestro e emissão de carbono no solo nos manejos e tratamento de cana-de-açúcar CARVALHO, C. M.; MILORI, D. M. B. P.; MOUNIER, S.; GARNIER, C.; LA SCALA JUNIOR, N.; FIGUEIREDO, E. B.; CORÁ, E.	150

PG45 - Quantum turbulence in a two-species Bose-Einstein condensate ^{23}Na - ^{41}K with tunable interactions CASTILHO, P. C. M.; PEDROZO-PENAFIEL, E.; VIVANCO, F. J.; FARIAS, K. M.; ROATI, G.; BAGNATO, V. S.	152
PG46 - Septina 4 : estrutura de possíveis complexos com outras septinas e interações CAVALCANTE, N.; GARRATT, R. C.	153
PG47 - An insight into design and safety of carbon nanotube and poly(amidoamine) nanocomposites through molecular dynamics simulations and flow cytometry CENTURION, L. M. P. C.; LELIMOUSIN, M.; BERNARDI, J. C.; ZUCOLOTTI, V.....	154
PG48 - Thermodynamic properties of transition metal nanoclusters CEZAR, H. M.; RONDINA, G. G.; SILVA, J. L. F.	156
PG49 - Adsorption of CO, NO and OH on transition-metal 13-atom clusters: a density functional theory investigation CHAVES, A. S.; SOBRINHO, D. G.; SILVA, J. L. F.....	157
PG50 - Quantum phase transition in a 2D vortex lattice CHAVIGURI, J. R. H.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.	159
PG51 - Tunelamento macroscópico de carga CHERUBIM, C.; BRITO, F.....	161
PG52 - Spontaneous generation of quantum turbulence through the decay of a giant vortex in a two-dimensional superfluid CIDRIM, A.; SANTOS, F. E. A.; BAGNATO, V. S.....	162
PG53 - Remote shimming coil controller over HTTP COELHO, F. B.; DIAS, D. M.; PIZETTA, D. C.; VIDOTO, E. L. G.; MARTINS, M. J.; TANNÚS, A.....	163
PG54 - Síntese e caracterização de perovskitas $\text{Sr}_{1-x}\text{Cu}_x\text{TiO}_3$ e $\text{SrTi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$ aplicada a catálise da reação de deslocamento água-gás COLETTA, V. C.; MARCOS, F. C. F.; NOGUEIRA, F. G. E.; BERNARDI, M. I. B.; ASSAF, E. M.; MASTELARO, V. R.	165
PG55 - Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares COMIN, C. H.; COSTA, L. F.	166
PG56 - Flexible four channel phased array MRI coil CONSALTER, D.; TANNUS, A.; VIDOTO, E.; MARTINS, M.; PAIVA, F.	167

PG57 - Development of a low-cost and fast-response genosensor CORRER, W.; ZUCOLOTTI, V.	168
PG58 - Electrical properties of P3HT:PCBM thin films used as active layers in organic solar cells COUTINHO, D. J.; FARIA, R. M.	169
PG59 - Majorana modes in a quantum dot CRUZ, A. R.; VERNEK, E.; EGUES, J. C.	171
PG60 - Estudo da microestrutura de polímeros conjugados via ressonância magnética nuclear CUNHA, G. P.; deAZEVEDO, E. R.; FARIA, G. C.	172
PG61 - Geração de ensembles e cálculos de energia livre na aplicação de Monte Carlo em um algoritmo de docking CUNHA, J. V. S.; NASCIMENTO, A. S.	174
PG62 - Rational synthesis of a cocrystal: 5-fluorouracil and 5-fluorocytosine DA SILVA, C. C. P.; ELLENA, J.	175
PG63 - Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. J.	177
PG64 - Estudos físicos conduzidos sobre proteína auxiliar de invasão do E.faecalis, ElrA, e seu regulador transcricional ElrR DE GROOTE, M. C. R.; HORJALES, E.	178
PG65 - Gamma ray astronomy DIPOLD, J.; SOUZA, V.	179
PG66 - Sensores ópticos baseados na reflexão interna DOMENEGUETI, J. F. M.; ZILIO, S. C.	181
PG67 - Comparative analysis of bones with complex networks DORO NETO, C.; FONTOURA COSTA, L. da.	182
PG68 - Ozone gas sensor based on strontium titanate film obtained by spin-coating deposition ESCANHOELA JÚNIOR, C. A.; SILVA, L. F.; AGUIR, K.; MASTELARO, V. R.	183
PG69 - Transporte controlado por barreiras em dispositivos semicondutores orgânicos de múltiplas camadas ESPIRITO SANTO, T. S. do; GUIMARAES, F. E. G.; FARIA, R. M.	185

PG70 - Recombinant production and crystallization of the pectinases from <i>Bacillus licheniformis</i> and <i>Xanthomonas campestris</i> EVANGELISTA, D. E.; POLIKARPOV, I.	186
PG71 - Estruturas sociais e fluxos de informação: análises para o participante FABBRI, R.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de.....	188
PG72 - Nanoconjugates based upon polyethylene terephthalate brushes/Au nanoparticles for biosensing FARIA, H. A. M.; ZUCOLOTTO, V.	189
PG73 - Busca de moldes estruturais para a engenharia de funções catalíticas FARRO, E. G. S.; NASCIMENTO. A. S.	190
PG74 - Um novo modelo de execução a fluxo de dados FERREIRA, F.; TRAVIESO, G.; RUGGIERO, C. A.	191
PG75 - Modelagem molecular de uma série sintética de agentes antichagásicos baseada em estudos de HQSAR e CoMFA FIORAVANTI, C. M.; FERREIRA, L. L. G.; ANDRICOPULO, A. D.	192
PG76 - Absorção de dois fótons de sistemas moleculares ramificados FONSECA, R. R.; VIVAS, M. G.; DE BONI, L.; MENDONÇA, C. R.	194
PG77 - Medidas de refletância difusa para o aprimoramento da dosimetria para fototerapias FORTUNATO, T. C.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; MORIYAMA, L. T.	195
PG78 - Strain effects on properties of water and ethanol adsorbed on transition metal substrates FREIRE, R. L. H.; TERESHCHUK, P.; KIEJNA, A.; SILVA, J. L. F.	196
PG79 - Formação de vórtices em um condensado de Bose-Einstein FRITSCH, A. R.; TAVARES, P. E. S.; BAHRAMI, A.; TONIN, Y. R.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S.	198
PG80 - On the phase transition of the one-dimensional Heisenberg spin-1/2 chain under correlated disorder GETELINA, J. C. A.; HOYOS NETO, J. A.	200
PG81 - Caracterização funcional e estrutural da beta-galactosidase de <i>Bifidobacterium bifidum</i> e seus mutantes GODOY, A. S.; CAMILLO, C. M.; POLIKARPOV, I.	201

PG82 - Desenvolvimento de uma microscopia óptica não linear por rotação da polarização elíptica GOMES, J. A. C.; MISOGUTI, L.	202
PG83 - Simulação da equação de Dirac em eletrodinâmica quântica de cavidades (EQC) GOMEZ, E. C.; MOUSSA, M. H. Y.	203
PG84 - Rastreamento de linfonodo sentinela através de técnicas de fluorescência óptica com o uso de indocianina verde GOVONE, A. B.; GARCÍA, P. G.; KURACHI, C.	204
PG85 - A simple model for electrocommunication: “refractoriness avoidance response” GUARIENTO, R. T.; MOSQUEIRO, T. S.; ALVES, A. B.; CAPUTI, A. A.; PINTO, R. D.	205
PG86 - Estudos funcionais da CrNIP7 de Chlamydomonas reinhardtii: uma proteína envolvida na biogênese de ribossomo GUTIERREZ, R. F.; AVACA-CRUSCA, J. S.; ARAÚJO, A. P. U.	207
PG87 - Optical connection of polymeric microstructures by nanofibers HENRIQUE, F. R.; MENDONÇA, C. R.	209
PG88 - Properties that arise from a depth-zoom analysis of the logistic map JUSTO, M. J. M.; BRUNO, O. M.	210
PG89 - Estudo de diferentes técnicas ópticas para o diagnóstico de doenças na lavoura de soja KUBOTA, T. M. K.; MAGALHÃES, A. B.; VILLAS, P. R.; MILORI, D. M. B. P.	212
PG90 - Structure-function correlation and conformational changes in the NTS1 C-terminal region and in the human Galectin-4 KUMAGAI, P. S.; NONATO, M. C.; BARUFFI, M. D.; WATTS, A.; COSTA FILHO, A. J. da	214
PG91 - Análise da interação não-canônica entre septinas: SEPT3 e septinas do grupo II LANZONI, P.; GARRATT, R. C.	216
PG92 - História da óptica no século XIX LAPORTE, R. S.; SILVA, C. C.	218
PG93 - Photodynamic inactivation of microorganisms which cause pulmonary diseases: presenting a new infrared light source LEITE, I. S.; GERALDE, M. C.; SALINA, A. C. G.; MEDEIROS, A. I.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M.	219

PG94 - Especificidade na interface G do dímero de septinas SEPT5-SEPT8 LEONARDO, D. A.; MACEDO, J. N.; GARRATT, R. C.	221
PG95 - Structural characterization of Trypanosoma brucei spliceosomal protein U5-15K LIMA, A. L.; THIEMANN, O. H.; SILVA, M. T. A.	222
PG96 - Estudos estruturais e moleculares de enzimas alvo de Xanthomonas albilineans para o desenvolvimento de novos candidatos a agroquímicos para a cultura de cana-de-açúcar LIMA, G. M. A.; GUIDO, R. V. C.	224
PG97 - Structural and functional studies of a fructosyltransferase of Bifidobacterium adolescentis from the family 32 of glycoside hydrolases LIMA, M. Z. T.; POLIKARPOV, I.; MUNIZ, J. R. C.	226
PG98 - Testemunha de emaranhamento generalizada LIMA, R. B. B.; SOARES-PINTO, D. O.	228
PG99 - Caracterização de uma série de acridinonas sintéticas com propriedades anticâncer. MAGALHAES, L. G.; MARQUES, F. B.; GRAEBIN, C. S.; ANDRICOPULO, A. D.	229
PG100 - Enolase de P. falciparum : biologia estrutural e triagem virtual de moléculas MALUF, F. V.; BACHEGA, J. F. R.; BUENO, R. V.; GARCIA, C. R. S.; OLIVA, G.; GUIDO, R. V. C.	231
PG101 - Aplicação da imagem por ressonância magnética para identificação de injúrias mecânicas e tecidos deteriorados em sementes MARASSI, A. G.; GOMES JUNIOR, F. G.; VIDOTO, E. L. G.; CONSALTER, D. M.; MARTINS, M. J.; TANNÚS, A.	233
PG102 - Estudo da possibilidade de detecção de matéria escura com telescópios Cherenkov MARCOMINI, J.; SOUZA FILHO, L. V. de.....	234
PG103 - Quantificação de gordura hepática utilizando MRS MARQUES, M. R. H.; PAIVA, F. F.....	235
PG104 - Análises da influência dos domínios carboxi-terminais das septinas na interação septina-septina MARTINS, C. S.; MACEDO, J. N. A.; ARAÚJO, A. P. U.	237
PG105 - O problema de Fermi-Pasta-Ulam MASCHIO, E. H. M.; MOUSSA, M. H. Y.....	239
PG106 - Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco Gymnotus carapo MATIAS, P.; SLAETS, J. F. W.....	240

PG107 - Modelagem molecular no desenvolvimento de modelos para estudos da permeabilidade

MATOS, K. S.; MODA, T. L.; ANDRICOPULO, A. D. 241

PG108 - Caracterização estrutural e funcional de FleQ de Pseudomonas e Xanthomonas: um importante fator de transcrição envolvido na expressão dos genes flagelares e de formação de biofilme

MATSUYAMA, B. Y.; NAVARRO, M. V. A. S. 243

PG109 - The atomic lighthouse E

MAXIMO, C. E.; COURTEILLE, Ph. W.; BACHELARD, R. 245

PG110 - Estudos de metatranscriptômica e proteômica: identificação e caracterização de novas enzimas com potencial na hidrólise de ligações glicosídicas

MELLO, B. L.; POLIKARPOV, I. 246

PG111 - Exploring the selectivity of metal ions in the active site of superoxide dismutase enzyme using site directed mutagenesis

MENDOZA, E.; GARRATT, R. C.; FERREIRA JÚNIOR, J. R. 247

PG112 - Identification and characterization of Staphylococcus aureus DacA enzyme inhibitors

MENEGHELLO, R.; NAVARRO, M. V. de A. S. 248

PG113 - Detecção de ruído e análise da confiabilidade de sinais adquiridos in vivo por Espectroscopia por Ressonância Magnética (MRS)

MENEZES, L. P.; PAIVA, F. F. 249

PG114 - Estados de Fock estacionários em eletrodinâmica quântica de cavidades

MERCADO, W. R.; MOUSSA, M. H. Y. 251

PG115 - Study of Ramsey fringes

MERCADO-GUTIERREZ, E. D.; POVEDA-CUEVAS, F. J.; DIAS, P. G.; MAGALHÃES, D. V.; BAGNATO, V. S. 252

PG116 - Estudo do mecanismo enzimático da di-adenilato ciclase responsável pela síntese de c-di-AMP em Staphylococcus aureus

MESQUISTA, N. C. M. R.; NAVARRO, M. V. S. A. 253

PG117 - Spontaneous symmetry breaking: Monte Carlo study comparing Metropolis and worm algorithm

MIGLORIA, A.; MENDES, T. 255

PG118 - Nonlinear ellipse rotation measurements at the tightly focused laser beam condition	
MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L.	256
PG119 - Structural and functional study of 10 fructosyltransferases from GH 32 and 68	
MONSALVE, M. A. E.; MUNIZ, J. R. C.	258
PG120 - Validação de uma técnica em ressonância magnética nuclear para observar a migração de moléculas entre poros com características físico-químicas diferentes	
MONTRAZI, E. T.; D'EURYDICE, M. N.; FORTULAN, C. A.; BONAGAMBA, T. J.	259
PG121 - Análise da distribuição de tempos de relaxação T_2 através do Método da Diagonalização Filtrada	
MORAES, T. B.; MONTRAZI, E. T.; COLNAGO, L. A.; BONAGAMBA, T. J.; MAGON, C. J.	261
PG122 - Produção e estudos estruturais de heterocomplexos de Septinas	
MORAIS, S. T. do B.; MACEDO, J. N. A.; ARAÚJO, A. P. U.	263
PG123 - Endocitose das isoformas da pulchellina em células HeLa	
MOREIRA, H. H. T. M.; ARAÚJO, A. P. U.; SANDVIG, K.	265
PG124 - Photonic bandgaps and Lighthouse effect in ultracold strontium clouds	
MORIYA, P. H.; SHIOZAKI, R. F.; COURTEILLE, Ph. W.	267
PG125 - Expressão em fungo filamentoso e caracterização bioquímica e estrutural da endoglucase de <i>Aspergillus terreus</i>	
MULINARI, E. J.; SEGATO, F.; BERNARDES, A.; MUNIZ, J. R. C.	268
PG126 - Evaluation of a volume- and charge-based solvation function on molecular docking	
MUNIZ, H. S.; NASCIMENTO, A. S.	270
PG127 - Evolução temporal de quase-partículas	
NARDI, L. M. C.; OLIVEIRA, L. N.	272
PG128 - Hidden symmetries, compass model, and Majorana fermions in frustrated magnetic insulators with strong spin-orbit interactions	
NATORI, W. M. H.; PEREIRA, R. G.	273
PG129 - Characterization of a fluorescence lifetime spectroscopy system for diagnostic purposes using an optic fiber probe	
NOGUEIRA, M. S.; D'ALMEIDA, C. P.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.	274

PG130 - Imaging the liquid/vapor interface of acetonitrile/water mixtures using sum frequency generation microscopy.	
OITICICA, P. R. A.; MIRANDA, P. B.....	276
PG131 - Projeto: “Caracterização molecular de Staphylococcus aureus resistentes à meticilina (MRSA) isolados de infecção de um hospital em São Carlos”	
OKADO, J. B.; CAMARGO, I. L. B. C.	277
PG132 - Aplicação da técnica de engenharia de reservatórios na teoria do laser	
OLIVEIRA NETO, F.; MOUSSA, M. H. Y.	279
PG133 - Modelagem comparativa da enzima benzoato CoA ligase (BCL) de Xanthomonas albilineans: alvo molecular para o desenvolvimento de novos agroquímicos.	
OLIVEIRA, A. A.; GUIDO, R. V. C.....	280
PG134 - Desenvolvimento de técnica de alinhamento óptico de um telescópio TMA	
OLIVEIRA, A. O.; SCADUTO, L. C. N.; CASTRO NETO, J. C. de.....	282
PG135 - Refratômetro diferencial para medida simultânea de Brix e sacarose	
OLIVEIRA, A. R.; DOMENEGUETI, J. F. M.; ZILIO, S. C.....	283
PG136 - Optical technique for evaluation and control of the chemical and microbiological process during yeast production	
OLIVEIRA, B. P.; MORIYAMA, L. T.; BAGNATO, V. S.....	284
PG137 - RMN aplicada a meios porosos: simulação computacional para relaxação transversal	
OLIVEIRA, E. L.; D’EURYDICE, M. N.; BONAGAMBA, T. J.....	285
PG138 - Fractais aplicados a análise de imagens microscópicas de organismos vegetais	
OLIVEIRA, I. M.; BRUNO, O. M.	287
PG139 - Molecular and Cellular Characterization of Photodynamic Therapy	
ONO, B. A.; KURACHI, C.	288
PG140 - Estudo da estrutura e parceiros proteicos da proteína codificada pelo gene micro-exon 14 (MEG-14) do parasita Schistosoma mansoni	
ORCIA, D.; LOPES, J. L.; MACEDO, J. N. A.; DeMARCO, R.....	289
PG141 - Estudos de dinâmica molecular da proteína TM1030 de thermotoga maritima	
PALOMINO SALCEDO, D. L.; HORJALES REBOREDO, E.	291
PG142 - Maximização do contraste ASL em sequências multi-fase com a introdução de uma modulação no ângulo de flip	
PASCHOAL, A. M.; PAIVA, F. F.....	292

PG143 - Dinâmica de portadores e confinamento quântico em sistemas eletrônicos multicomponentes formados em nanofios heteroestruturadas e em camadas semicondutoras múltiplas	
PATRICIO, M. A. T.; PUSEP, Y. A.	294
PG144 - Caracterização estrutural e funcional de novos ligantes do receptor PPAR gama	
PAULA, K. de; NASCIMENTO, A. S.	295
PG145 - Planejamento de inibidores da enzima cruzaina candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas	
PAULI, I.; FERREIRA, R. S.; DESSOY, M. A.; SAMPAIO, T. S.; SLAFER, B.; SOUZA, M. L.; ANDRICOPULO, R. K.; SALES, A. I. L.; OLIVA, G.; DIAS, L. C.; ANDRICOPULO, A. D.	296
PG146 - Production of a Bose-Einstein condensate of two atomic species (Na/K)	
PEÑAFIEL, E. P.; VIVANCO, F. J.; CASTILHO, P.; KRUGER, A.; ROATI, G.; FARIAS, K. M.; BAGNATO, V. S.	298
PG147 - Estudo sobre ligação enzimática improdutiva de enzimas em celulose e biomassa	
PELLEGRINI, V. O. A.; POLIKARPOV, I.; WESTH, P.	299
PG148 - Cluster explosive synchronization in complex networks	
JI, P.; PERON, T. K. D. M.; MENCK, P. J.; RODRIGUES, F. A.; KURTHS, J.	300
PG149 - Quantum speed limit e geometria da informação	
PIRES, D. P.; SOARES-PINTO, D. O.	301
PG150 - Estratégias para detecção e tratamento do melanoma	
PIRES, L.; NOGUEIRA, M. S.; GRECCO, C.; PRATAVIEIRA, S.; MORIYAMA, L. T.; KURACHI, C.	303
PG151 - Desenvolvimento de técnicas de aquisição e transmissão paralela para aplicações em imagens por ressonância magnética	
PIZETTA, D. C.; TANNÚS, A.	305
PG152 - Implementação de técnicas de imagens por ressonância magnética para o estudo de meios porosos	
POLI, R. S.; KREBS, M.; SOUZA, A.; VIDOTO, E. L. G.; PAIVA, F.; TANNUS, A.; BONAGAMBA, T. J.	306
PG153 - High energy hadronic interactions and composition of cosmic rays	
PRADO, R. R.; CONCEIÇÃO, R.; PIMENTA, M.; SOUZA, V.	308
PG154 - Processamento digital de sinais aplicado a análise de distribuição de tempos de relaxação em ressonância magnética nuclear	
QUEIROZ, G. E. T.; GUIDO, R. C.	310

- PG155 - Estudos estruturais e funcionais de uma endoglucanase pertencente a família das glicosil-hidrolases 45**
RAMIA, M. P.; GODOY, A.; CAMILO, C.; KADOWAKI, M.; POLIKARPOV, I..... 311
- PG156 - Avaliação do uso da técnica de espectroscopia de emissão óptica com plasma induzido por laser (LIBS) como ferramenta para detecção de doenças na cultura de soja**
RANULFI, A. C.; MAGALHÃES, A. B.; MILORI, D. M. B. P..... 312
- PG157 - Structural and electronic properties of bulk graphite: a DFT investigation within van der Waals corrections**
REGO, C. R. C.; TERESHCHUK, P.; SILVA, J. L. F. da; OLIVEIRA, L. N. de..... 314
- PG158 - Seleção, identificação e produção de xiloses isomerases importantes na produção de bioetanol**
REIS, C. V.; CAMILO, C. M.; POLIKARPOV, I. 315
- PG159 - Avaliação do dano em terapia fotodinâmica com luz intensa pulsada com diferentes fotossensibilizadores**
REQUENA, M. B.; NARDI, A. B.; ESCOBAR, A.; ROCHA, R. W.; FORTUNATO, T. C.; WEIS, P. T.; BAGNATO, V. S.; MENEZES, P. F. C. 316
- PG160 - The use of gold nanorods for electrochemical sensing of phenolic compounds in environmental and biological samples**
RIBOVSKI, L.; JANEGITZ, B. C.; MARANGONI, V. S.; SANTOS, F. A.; ZUCOLOTTI, V. 318
- PG161 - Antimicrobial polyelectrolytes in action - investigating their molecular Interactions with cell membrane models (Langmuir Films) using the surface nonlinear SFG spectroscopy**
RIMOLI, C. V.; SENRA, T. D. A.; CAMPANA FILHO, S. P.; MIRANDA, P. B..... 319
- PG162 - Synthesis and characterization of the microwave ceramics based on complex perovskite (Ba,M)(B',Nb)O₃ (M = La, Sr and B' = Ca, Cd)**
RODRIGUES, J. E. F. S.; BEZERRA, D. M.; SANTA ROSA, W.; HERNANDES, A. C..... 321
- PG163 - Increasing the superficial homogeneity and ALA-induced PpIX production in pig skin**
RODRIGUES, P. G. S.; MENEZES, P. F. C.; PAOLILLO, F. R.; REQUENA, M. B.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S..... 323
- PG164 - Planejamento baseado na estrutura da enzima PtpA de Mycobacterium tuberculosis: modelo farmacofórico e triagem virtual**
RODRIGUES, V. K. T.; GUIDO, R. V. C. 324
- PG165 - Toward the second generation of brazilian atomic fountain**
RODRIGUEZ, A.; HOLANDA, G.; MULLER, S.; BAGNATO, V. S.; MAGALHÃES, D. V. 326

PG166 - Crystal structure of Schistosoma mansoni hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase isoform 1 (HGPRT1) ROMANELLO, L.; SOUZA, J. R. T.; BIRD, L.; NETTLESHIP, J.; OWENS, R.; REDDIVARI, Y.; BRANDÃO NETO, J.; PEREIRA, H. M.	327
PG167 - Redes complexas aplicadas ao estudo de interação de proteínas RONQUI, J. R. F.; TRAVIESO, G.	329
PG168 - Evaluation of skin collagen fibers from second-harmonic generation images ROSA, R. G. I. T.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.	331
PG169 - Caracterização Enzimática e Estrutural do domínio EAL da STM3615 de Salmonella enterica ROSSETO, F. R.; NAVARRO, M. V. A. S.	332
PG170 - Engenharia de potenciais cononantes em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades ROSSETTI, R. F.; MOUSSA, M. H. Y.	334
PG171 - Multi-compounds transparent conducting oxides: the example of $\text{In}_2\text{O}_3\text{-SnO}_2$ SABINO, F. P.; SILVA, J. L. F.; OLIVEIRA, L. N.	335
PG172 - Antiferromagnetic interaction evidenced in "plasdoped" polyaniline (PANI-DDoEPSA)_{0.5} by Electron Spin Resonance SANTANA, V. T.; WALMSLEY, L.; DJURADO, D.; TRAVERS, J. P.; PRON, A.; NASCIMENTO, O. R.	336
PG173 - Synthesis and characterization of amine-modified graphenes for sensors applications SANTOS, F. A.; NOGUEIRA, V. H. R.; JANEGITZ, B. C.; ZUCOLOTTO, V.	338
PG174 - Epidemiologia molecular de Enterobacteriaceae produtoras de KPC e outras beta-lactamases SANTOS, J.; CAMARGO, I. L. B. C.	339
PG175 - Water monolayer adsorbed on gypsum at room temperatureff SANTOS, J. C. C.; MIRANDA, P. B.	340
PG176 - Abordagem de sistema quântico aberto para biologia quântica SANTOS, M. L.; PINTO, D. O. S.	341
PG177 - Predição de complexos multiméricos através de análise de acoplamento direto e modelagem baseada em estrutura SANTOS, R. N.; MORCOS, F.; JANA, B.; ONUCHIC, J. N.; ANDRICOPULO, A. D.	342

PG178 - Characterization of components of the biosynthesis and insertion pathways of selenocysteine in Naegleria gruberi: Selenophosphate synthetase and tRNASec SANTOS, T. M.; THIEMANN, O. H.....	343
PG179 - Análise de assimetria e irregularidade de borda de lesões melanocíticas TRAVIESO, G.; FONTOURA DA COSTA, L.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; SALVIO, G.; SBRISSA, D.	345
PG180 - Superadiabaticidade em RMN SEGURA, C. O.; SOARES-PINTO, D. O.....	347
PG181 - Avaliação da terapia fotodinâmica em cultivo celular tridimensional por levitação magnética SEKIMOTO, L. S. A.; KURACHI, C.	348
PG182 - Caracterização das interações macromoleculares das proteínas envolvidas na síntese de selenocisteínas em Escherichia coli SERRAO, V. H. B.; PORTUGAL, R. V.; HEEL, M. van; THIEMANN, O. H.	350
PG183 - Lattice QCD and heavy-quark physics SERRONE, W. M.; MENDES, T.....	352
PG184 - Protótipo dataflow implementado em FPGA SILVA JUNIOR, J. T.; MATIAS, P.; RUGGIERO, C. A.	354
PG185 - Differential geometry approach for ensemble analyses SILVA NETO, A. M. da; MONTALVÃO, R. W.....	356
PG186 - Novas estratégias para o diagnóstico de onicomicose e tratamento por terapia fotodinâmica SILVA, A. P.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M.	357
PG187 - O KBDM como ferramenta para o processamento de dados clínicos de espectroscopia por Ressonância Magnética: estudos preliminares SILVA, D. M. D. D. da; LIMA, T. S.; PAIVA, F. F.	359
PG188 - Estudos sobre domínios sensores extracelulares CHASE nas vias do c-di-GMP SILVA, E. E. D.; NAVARRO, M. V. A. S.	361
PG189 - Estrutura multiescala de redes complexas SILVA, F. N.; COSTA, L. da F.....	363
PG190 - The quantum power of general quantum correlations and QUDIT systems SILVA, I. A.; SOARES-PINTO, D. O.; AZEVEDO, E. R.	365

PG191 - Electron paramagnetic resonance study of phosphate glasses doped with Fe(III) and Mn(II) ions	
SILVA, I. D. A.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; NALIN, M.; SIQUEIRA, R. F.....	367
PG192 - Investigation of the snRNPs Sm cores involved in Trypanosoma brucei SL trans splicing	
SILVA, I. R.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.....	368
PG193 - Engineering of the extraordinary optical transmission of metallic gratings via Er^{3+} doped tellurite glass	
SILVA, O. B.; GARCIA RIVERA, V. A.; MAREGA JUNIOR, E.	370
PG194 - O princípio de Landauer, emaranhamento e decoerência	
MOUSSA, M. H. Y.; SILVA, R. M.	372
PG195 - Determination of protein-protein complexes from sparse experimental data	
SILVA, S. R.; MONTALVAO, R. W.	373
PG196 - BEC dynamics with solitons and vortices	
SMAIRA, A. F.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.	374
PG197 - Superabsorção via engenharia de interações átomo-campo e a derivação do princípio de Landauer a partir da segunda lei da termodinâmica	
SOARES, P. M. S. B.; MOUSSA, M. H. Y.	375
PG198 - Strong coupling regime in the interaction of surface plasmon polaritons and excitons in InAs/GaAs quantum dots	
SOBREIRA, F. W. A.; PEREIRA, R. G.; MAREGA JUNIOR, E.	377
PG199 - Ideal thickness for PAMAM/SWNT bilayers in EIS biosensors	
SOUSA, M. A. M.; SIQUEIRA JUNIOR, J. R.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	379
PG200 - Estudo da diversidade química e biológica de moduladores e alvos biológicos para terapia da doença de Chagas	
SOUZA, A. S.; ANDRICOPULO, A. D.	380
PG201 - Planejamento e otimização de novos inibidores da enzima cruzaina de Trypanosoma cruzi	
SOUZA, M. L.; ANDRICOPULO, A. D.....	381
PG202 - Modular system for non-real-time subsystem management in Nuclear Magnetic Resonance Digital Spectrometer	
SOUZA, P. V. B. D.; COELHO, F. B.; PIZETTA, D. C.; SILVA, D. M. D. D.; MARTINS, M. J.; VIDOTO, . L. G.; TANNUS, A.....	382

PG203 - Characterization of excited electronic states in free-base porphyrin molecules SOUZA, T. G. B; DEBONI, L.	383
PG204 - Identification of Mn/FeSODs structural determinants necessary to metal specificity STELMASTCHUK, L. B. F.; BACHEGA, J. F. R.; GARRATT, R. C.; FERREIRA JÚNIOR, J. R. S.	385
PG205 - Detecção de infravermelho para diagnóstico de tumores não profundos STRINGASCI, M. D.; SALVIO, A. G.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.	387
PG206 - Formulações nanoestruturadas contendo curcumina na otimização da terapia fotodinâmica SUZUKI, I. L.; INADA, N.; KURACHI, C.; ZUCOLOTTI, V.; SILVA, A. P.; MARANGONI, V. S. ..	389
PG207 - Excitations in a perturbed ⁸⁷Rb Bose-Einstein condensate TAVARES, P. E. S.; FRITSCH, A. R.; BAHRAMI, A.; TONIN, Y. R.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S.	391
PG208 - Engenharia de máquina de stirling, No-Go Theorems e Princípio de Landauer TEIZEN, V. F.; MOUSSA, M. H. Y.	393
PG209 - Dynamic stability of a multi-charged vortex in Bose-Einstein condensates TELES, R. P.; SANTOS, F. E. A.; BAGNATO, V. S.	394
PG210 - Arquiteturas moleculares de novos sais inorgânicos de lamivudina, um fármaco anti-HIV TENORIO, J. C.; ELLENA, J. A.	395
PG211 - Estudos estruturais e funcionais de expansinas, proteínas semelhantes à expansinas e swoleninas & proteômica da bactéria termofílica Thermogemmatipora CEPA T88 . TOMAZINI JUNIOR, A.; STOTT, M.; SPARLING, R.; LEVIN, D. B.; POLIKARPOV, I.	396
PG212 - Fabrication of optical microcavities by two-photon polymerization TOMAZIO, N. B.; OTUKA, A. J. G.; ALMEIDA, G. F. B.; MENDONÇA, C. R.	398
PG213 - Substituição encontrada no sítio ativo da enzima Metiltioadenosina Fosforilase de Schistosoma mansoni, pode explicar o aumento da afinidade pelo substrato alternativo, adenosina. TORINI, J. R.; BRANDÃO NETO, J.; PEREIRA, H. M.	399
PG214 - Study of PelD mechanism, a protein involved in biofilm formation of Pseudomonas aeruginosa TORRES, N. U.; SOUSA, S. S. e; MATSUYAMA, B. Y.; CHELESKI, J.; NICASTRO, G.; BALDINI, R. L.; NAVARRO, M. V. de A. S.	401

PG215 - Espectroscopia de correlação de fluorescência (FCS) aplicada em estudos de sistemas moleculares, biológicos e celulares TSUTAE, F. M.; GUIMARÃES, F. E. G.	403
PG216 - Finite temperature quantum field theory and the Unruh effect ULIANA, C.; VANZELLA, D.	405
PG217 - Authorship identification using network dynamics VALENCIA, C. A.; AMANCIO, D. R.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	406
PG218 - Optical enhancement in spherical submicromirrors arrays aiming application in OLEDs VALENTE, G. T.; SPADA, E. R.; FARIA, R. M.; GUIMARAES, F. E. G.	407
PG219 - Computação quântica adiabática usando Qubits supercondutores VARGAS, J. A.; BRITO, F.	408
PG220 - Build and test of 2D MOT source for Na atoms: comparison with the Zeeman slower case VIVANCO, F. A. J.; PEÑAFIEL, E. E. P.; KRUGER, A. L.; FARIAS, K. M.; BAGNATO, V. S.	409
PG221 - Modelagem de grãos confinados em invólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem VRECH, G.; COSTA, L. F.	410
PG222 - Imagem de fluorescência aplicada em doenças de citros WETTERICH, C. B.; MARCASSA, L. G.	411
PG223 - Multilayer ultrafine properties obtained by spin-coating layer-by-layer ZAGO, L. A.; GUIMARAES, F. E. G.	412
PG224 - Transporte de carga através de ponto quântico correlacionado: uma abordagem por teoria do funcional da densidade ZAWADZKI, K.; OLIVEIRA, L. N.	413



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

IC1

Estudo da incorporação de corantes orgânicos catiônicos em matrizes mesoporosas sódio-aluminosilicato por troca iônica

ALMEIDA FILHO, F. P.¹; FERRARI, C. R.¹; BOTELHO, M. B. S.²; CAMARGO, A. S. S.¹

flavio.pin.filho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade de Brasília - UnB

O compromisso com o meio ambiente e a necessidade da implantação de um sistema de gestão e controle de resíduos tem se tornado cada vez mais presente nas indústrias brasileiras, tendo em vista a quantidade de impactos negativos que a má gestão destes resíduos pode provocar na natureza. Neste sentido, uma nova metodologia de tratamento de efluentes da indústria têxtil foi proposta neste trabalho através da adsorção seletiva de espécies catiônicas por inserção molecular assistida por troca iônica. Para demonstrar a eficiência dessa abordagem, a matriz mesoporosa sódio-aluminosilicato (1), preparada por metodologia sol-gel, foi utilizada como agente adsorvente do corante catiônico Rodamina 6G (R6G). A capacidade e a taxa de adsorção da R6G foram investigadas para diferentes tempos de contato ($t = 1h, 3h, 6h, 12h, 24h$ e $48h$) e pH da solução do corante ($pH = 4$ à 10) bem como para diferentes composições da matriz ($Si_{1-x}Al_xNa_xO_2$, $0.1 < x < 0.33$). Foram testados também três ciclos de reutilização da matriz através da calcinação da mesma à $600^\circ C$ por 2 horas. Encontramos uma adsorção máxima de $0,098mmol/g$ em $pH=7$ e confirmamos a possibilidade de reutilização da matriz após queima do corante por pelo menos três ciclos.

Palavras-chave: Rodamina 6G. Sol-gel. Sódio-aluminosilicato.

Referências:

1 DESHPANDE, R. R.; ECKERT, H. Sol-gel preparation of mesoporous sodium aluminosilicate glasses: mechanistic and structural investigations by solid state nuclear magnetic resonance. **Journal of Materials Chemistry**, v. 19, n. 21, p. 3419-3426, 2009.

IC2

Clonagem e expressão do gene codificante da proteína do capsídeo de leishmaniavirus LRV1-4

BARBOSA, P. C.¹; AZEVEDO, E. C.¹; THIEMANN, O. H.¹

paola.barbosa@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O gênero *Leishmania* é composto por parasitas protozoários que causam um complexo de enfermidades chamadas de leishmanioses, atingindo principalmente seus hospedeiros vertebrados, as leishmanioses são causadas por diferentes espécies morfológicamente semelhantes, causando desde lesões cutâneas até casos viscerais variando de espécie à espécie. A falta de uma vacina eficaz, além de diversas formas resistentes aos raros fármacos existentes, faz com que o estudos sobre a doença tornam-se extremamente necessários. (1) O vírus LRV1-4, ou *Leishmania* RNA vírus, único vírus que infecta células de *Leishmania* pertence à família *Totiviridae*. Esse vírus possui um capsídeo icosaédrico e RNA de fita dupla. O material genético do vírus LRV1-4 codifica duas proteínas: a proteína capsidial e uma RNA polimerase. Em geral, proteínas do capsídeo asseguram a propagação do genoma e garantem proteção quanto às nucleases intra e extracelulares existentes. Contudo, verifica-se que em partículas de LRV1-4 completamente montadas as proteínas do capsídeo também possuem atividade endoribonuclease específica para a segmentação do seu próprio RNA, sugerindo assim que, esta atividade extra pode vir a controlar o número de cópias virais em células hospedeiras após a montagem. (2) Este trabalho visa a expressão heteróloga e a purificação da proteína constituinte do capsídeo, mediante ao uso de técnicas de clonagem em diversos vetores de expressão (3) - entre eles, pET28a(+), pET29a(+) e pET32a(+) (Novagen) - para posterior realização de ensaios para análise das condições de cristalização, medidas de difração de raios-X para a resolução de sua estrutura e visualização por meio de técnicas como Microscopia Eletrônica de Transmissão utilizando Contraste Negativo (NS-EM) e Crio-Microscopia (Cryo-EM).

Palavras-chave: Leishmaniose. *Leishmania* RNA virus. Expressão de proteínas.

Referências:

- 1 DOSTÁLOVÁ, A.; VOLF, P. *Leishmania* development in sand flies: parasite-vector interactions overview. **Parasites & Vectors**, v. 5, p. 276, 2012. doi:10.1186/1756-3305-5-276.
- 2 RO, Y. T. et al. Evidence that the fully assembled capsid of *Leishmania* RNA virus 1-4 possesses catalytically active endoribonuclease activity. **Experimental and Molecular Medicine**, v. 36, n. 2, p. 145-156, 2004.
- 3 CADD, T.L.; PATTERSON, J.L. Synthesis of virus like particles by expression of the putative capsid protein of *Leishmania* RNA virus in a recombinant baculovirus expression system. **Journal of Virology**, v. 68, n.1, p.358-365, 1994.

IC3

Implementação de um modulador de cristal líquido de baixo custo para a técnica de varredura-z heterodina

BERNARDI, M. R.¹; MISOGUTI, L.¹

marcos.rodrigues@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste projeto de iniciação científica propomos usar um modulador de baixo custo, baseado no uso de um cristal líquido, extraído de óculos comerciais de TV 3D. Em trabalhos preliminares vimos que nesse modulador, ao receber uma simples tensão DC ou uma tensão AC de baixa frequência por muito tempo, ocorre inomogeneidade do alinhamento dos cristais líquidos, e dessa forma, se observa distorções na luz transmitida pelo mesmo. Para sanar esse problema, os fabricantes de moduladores recomendam aplicar uma tensão AC (2 kHz) de fundo para evitar este problema. Dessa forma realizamos um estudo sistemático da aplicação de tensão AC de alta frequência para viabilizar o funcionamento contínuo desse modulador de cristal líquido. Para verificar se o nosso modulador é funcional estamos realizando aplicação desse modulador de cristal líquido de baixo custo na técnica de varredura-z heterodina. A técnica de varredura-z heterodina é utilizada para determinar propriedades ópticas não lineares de diversos materiais. (1) O aparato experimental é simples, envolvendo um feixe laser CW que passa por um modulador controlado por um gerador de sinal que permite a modulação senoidal da amplitude (10%) com frequência variável. O feixe modulado é focalizado na amostra com uma lente e a amostra por sua vez é deslocada na direção de propagação do feixe (direção-z). Um detector de Si faz a medida da energia transmitida através de uma abertura no campo distante. O detector é conectado ao lock-in de duas fases, permitindo a leitura de fase e amplitude. (2) Os óculos comerciais de cristal líquido são vantajosos devido ao seu custo relativamente baixo por causa do uso em larga escala em óculos ativos para TV 3D. Esses óculos ativos têm obturadores que usam polarizadores e cristais líquidos para chaveamento temporal das imagens vistas pelo olho esquerdo e direito. Os obturadores permitem também uma modulação parcial da intensidade de um feixe de luz fazendo-se uma correta modulação da tensão sobre o cristal líquido. Uma vez que nossos trabalhos preliminares demonstraram a viabilidade do uso de lente da TV 3D, neste projeto iremos nos concentrar na melhoria do sistema. O principal trabalho será o estudo sistemático do modulador para que todos os parâmetros de resposta temporal, amplitude de modulação, etc., sejam estabelecidos com aplicação de tensão AC de alta frequência para evitar a degradação do cristal líquido. Iremos também usar o modulador produzido para diminuir as limitações do uso mais generalizado da técnica de varredura-z heterodina. Neste método poderão ser realizadas medidas de processos não lineares lentos do tipo absorvedores saturáveis ou térmicas, por exemplo.

Palavras-chave: Varredura-z. Óptica não linear. Modulador eletro-óptico.

Referências:

1 SHEIK-BAHAE, M. et al. Nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, p.760-769,1990.doi: 10.1109/ 3.53394. .



2 GUEDES, I. et al. Heterodyne Z-scan measurements of slow absorbers. **Journal of Applied Physics**, v.101, p.063112,2007.doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.2713936>.

IC4

Structural and molecular studies of fosfopanteteinil transferase enzyme from *Xanthomonas albilineans*

BERTOLINO, D. E.¹; LIMA, G. M. A.²; GUIDO, R. V. C.²

dayanebertolino@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Sugarcane is a major source of renewable energy, constituting the most important raw material in the search for clean and sustainable energy. The environmental benefits collected from the production and use of sugarcane derivatives boost the development of new methods and products to improve the generation of bioenergy. (1) The occurrence and severity of plant diseases such as leaf scald are serious limiting factor for increasing sugarcane production. (2) The disease, caused by the bacterium *Xanthomonas albilineans*, causes decreased productivity, early reform of fields and drop in the juice quality, leading to significant economic losses. Currently, there are no chemical or biological alternatives available for controlling this phytopathology. Therefore, there is an urgent need for the development of new effective, selective, low cost and environmental safe pesticides. The *X. albilineans* produces a family of antibiotics and phytotoxins known as albidins. The enzymes involved in the biosynthesis of albidins are extremely attractive for the design of new agrochemicals. In this context, phosphopanteteinyl transferase (XaPPT, EC 2.7.8.7) is an essential enzyme for the development of *X. albilineans*. (3) The objectives of this work are the development of standardize *X. albilineans* cultures and initial structural molecular biology studies on XaPPT. Growing *X. albilineans* culture was standardized and molecular biology studies on XaPPT were conducted. Classical and modern strategies were successfully employed for cloning of XaPPT. The results indicated protein was soluble expressed and purification protocols suggest the production of pure protein suitable for enzyme kinetics and structural determination studies.

Keywords: Sugarcane. *Xanthomonas albilineans*. Pesticides.

Referências:

- 1 OERKE, E.C. Crops losses to pests. **Journal of Agricultural Science**, v. 144, n. 1, p. 33, 2005.
- 2 BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Secretaria de Produção e Agroenergia. Departamento da Cana-de-açúcar de Agroenergia. **Análise comparativa do desempenho das safras 2012-2013 e 2011-2012**: dados acumulados. Disponível em: <http://www.agricultura.gov.br/arq_editor/file/Desenvolvimento_Sustentavel/Agroenergia/estatisticas/producao/OUTU-\BR0_2012/analise%20comparativa%2023_10_12%20%20acumulada.pdf>. Acesso em: 29 jan. 2014.
- 3 BIRCH, G.; KONG, H. *Xanthomonas albilineans* and the antipathogenesis approach to disease control. **Molecular Plant Pathology**, v. 2, n. 1, p. 1-11, 2001.

IC5

A density functional theory investigation of the structural and electronic properties of quaternary semiconductors

BESSE, R.¹; SABINO, F. P.¹; DA SILVA, J. L. F.²

rafael.besse@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

There is a great interest in the development of new materials with wide band gaps for designed technological applications. Recently, experimental studies (1) have identified a new family of compounds with composition $\text{Cs}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}_3^{\text{IV}}\text{Q}_8$ ($\text{M}^{\text{II}} = \text{Mg, Zn, Cd, Hg}$; $\text{M}^{\text{IV}} = \text{Ge, Sn}$; $\text{Q} = \text{S, Se, Te}$), however, due to the experimental difficulties to synthesize all those possible compositions, only 11 compounds were synthesized and characterized. To contribute to the solution of this problem, we propose to extend the study for the 24 possible compositions using first-principles quantum chemistry calculations, based on density functional theory within the generalized gradient approximation (GGA) and the hybrid HSE06 functional for the exchange-correlation functional. The Kohn-Sham equations were solved using the projected augmented wave (PAW) method as implemented in the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP). (2) The compounds $\text{Cs}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}_3^{\text{IV}}\text{Q}_8$ crystallize in the orthorhombic structure (space group $P2_12_12_1$ and 4 formula units in the unit cell) composed by weak interacting layers stacked along the [010] direction, and hence, its correct description is a challenge for GGA functionals. Thus, we employed the van der Waals corrections proposed by Tkatchenko and Scheffler (3) to improve the description of the interlayer distances. The equilibrium structures were obtained by minimization of the stress tensor and atomic forces on every atom. The calculated lattice parameters a_0 and c_0 are in good agreement with experimental values, i.e., errors smaller than 4.3%, however, GGA overestimates b_0 (interlayer spacing direction) by nearly 7%, while the van der Waals correction decrease this lattice parameter substantially and underestimate b_0 by nearly 6%. Except small deviations, we found that the band gap scales almost linearly with the equilibrium volume, which depends on the chalcogen chemical specie, being consistent with experimental results. Nevertheless, the magnitude of the band gap is largely underestimate by GGA, hence the HSE06 was employed, and yields results close to the experimental observations using the van der Waals equilibrium volume.

Keywords: Semiconductors. Density functional theory. Electronic structure.

Referências:

1 MORRIS, C. D. et al . $\text{Cs}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}_3^{\text{IV}}\text{Q}_8$ ($\text{Q} = \text{S, Se, Te}$): an extensive family of layered semiconductors with diverse band gaps. **Chemistry of Materials**, v. 25, n. 16, p. 3344-3356, 2013.

2 KRESSE, G.; FURTHMÜLLER, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. **Physical Review B**, v. 54, n. 16, p. 11169-11186, 1996.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 TKATCHENKO, A. et al. Accurate and efficient method for many-body van der waals interactions. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 23, p. 236402-1-236402-5, 2012.

IC6

Characterization of the protein-protein interactions of spliceosomal U5-200K in *Trypanosoma brucei*.

BORALLI, C. M. S.¹; ROSA e SILVA, I.¹; SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹

camila.boralli@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The excision of intronic sequences from precursor mRNAs is a critical step during eukaryotic gene expression. This reaction is catalyzed by the spliceosome, a macromolecular complex composed of small nuclear ribonucleoproteins (U1, U2, U4, U5 e U6 snRNPs) and many additional proteins. Spliceosome assembly and splicing catalysis occur in an ordered multistep process, which includes multiple conformational rearrangements. (1) In trypanosomes, little is known about the components of the splicing machinery and their assembly and biogenesis. The expression of all protein-encoding genes, which are arranged in long polycistronic units, requires trans splicing. Only two genes are additionally processed by cis splicing. During trans splicing, a short noncoding miniexon, derived from the spliced leader (SL) RNA, is added to each protein-encoding exon. (2) U5-200k is a U5 snRNP specific component and is required for activation of B* catalytic complex, unwinding the U4/U6 snRNAs heteroduplex through its ATPase activity. This protein has helicase and ATPase domains but does not conserve the C-terminal Sec63 domain in *T. brucei*, which is believed to recruit other splicing factors. (3) For U5-200K function investigation, full length and C-terminally truncated constructs of *T. brucei* U5-200k were cloned into pC-PTP-neo vector and transfected in procyclic *T. brucei*, strain 427. PTP (ProtC-TEV-ProtA) technique allows tandem affinity purification and identify protein-protein and protein-RNA interactions. Clones were selected with 40ug/mL of geneticin and correct genomic locus insertion was confirmed by PCR and PTP-tag expression was demonstrated by Western blotting. Our results may provide new information on *T. brucei* U5-200K interaction partners.

Keywords: *Trypanosoma brucei*. Trans-splicing. U5-200k.

Referências:

1 MOZAFFARI-JOVIN, S.; WANDERSLEBEN, T.; SANTOS, K. F.; WILL, C. L.; LÜHRMANN, R.; WAHL, M. C. Novel regulatory principles of the spliceosomal Brr2 RNA helicase and links to retinal disease in humans. **RNA Biology**, v. 11, n. 4, p. 298-312, 2014.

2 GÜNZL, A. The pre-mRNA splicing machinery of trypanosomes: complex or simplified?. **Eukaryotic Cell**, v. 9, n. 8, p. 1159-1170, 2010.

3 SILVA, M. T.; AMBRÓSIO, D. L.; TREVELIN, C. C.; WATANABE, T. F.; LAURE, H. J.; GREENE, L. J.; ROSA, J. C.; VALENTINI, S. R.; CICARELLI, R. M. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 106, n. 2, p. 130-138, 2011.

IC7

Biosensor development for hormone melatonin detection

BRAMORSKI, C. B.¹; BRAZACA, L. C.¹; MARKUS, R. P.²; ZUCOLOTTO, V.¹

camila.bramorski@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Biociências - USP

Melatonin is a hormone present in most living beings and is one of the oldest biological indicators in nature. (1) Its main function is related to the regulation of the sleep-wake cycle, besides it is an important biological antioxidant. (2) Several studies show that abnormal melatonin levels are related to the development of diseases such as hypertension, type II diabetes, depression, insomnia and some types of cancer, such as breast and colorectal. (3) Consequently, detecting and quantifying serum concentration of this hormone is an important tool for the medical field. The detection of this hormone is usually performed by ELISA and radioimmunoassay tests, which in despite of the precision, present high costs and require time and specialized researchers. Hence, it is necessary to develop more simple and affordable techniques. Electrochemical sensors are low-cost devices, perform quick analysis and have a simple construction, also presenting great potential for industrialization. Here we developed an electrochemical biosensor to detect and quantify the hormone melatonin based on cyclic voltammetry through thin PANI/PVS (Polyaniline/poly (vinyl sulfonic acid)) films. An ITO platform was coated with conductive polymers PANI/PVS using the layer-by-layer technique. The biosensor was capable to detect melatonin in a range concentration of 10^{-4} to $5 \times 10^{-6} \text{ mol.L}^{-1}$. The limit of detection was $2,824 \times 10^{-6} \text{ mol.L}^{-1}$ and the electrode was stable under successive measurements.

Keywords: Melatonin. PANI/PVS films. Electrochemical biosensor.

Referências:

1 CLAUSTRAT, B.; BRUN, J.; CHAZOT, G. The basic physiology and pathophysiology of melatonin. **Sleep Medicine Reviews**, v. 9, n. 1, p. 11-24, 2005.

2 REITER, R. J. The melatonin rhythm, both a clock and a calendar. **Experientia**, v. 49, n. 8, p. 654-664, 1993.

3 LEÓN, J.; CASADO, J.; JIMENEZ RUIZ, S. M. Melatonin reduces endothelin-1 expression and secretion in colon cancer cells through the inactivation of foxo-1 and nf-jb. **Journal of Pineal Research**, v. 56, n. 4, p. 415-426, 2014.

IC8

Jornal Digital: difusão do processo do consumo e tratamento da água por alunos do ensino fundamental II

CAMPELO, R.¹; RADICCHI, G. R.²

rafael.campelo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Secretaria da Educação do Estado de São Paulo

Cada vez mais têm-se discutido estratégias de conscientização e educação para um consumo racional da água, evitando o desperdício e buscando alternativas para a sua reutilização.(1) Nesse sentido, os objetivos deste projeto de pesquisa foram conscientizar os alunos do 6º ano do ensino fundamental II da rede pública de ensino, sobre a utilização da água como recurso natural, apresentando-lhes informações sobre o uso consciente deste recurso para evitar a escassez de água no planeta; pesquisarem conceitos relacionados a saneamento básico e de doenças provenientes da utilização de água contaminada e propiciar aos bolsistas de iniciação científica o contato com a escola pública, permitindo-lhes ter experiências em sala de aula. As atividades foram desenvolvidas com três turmas do 6º ano do ensino fundamental II num total de 120 alunos da E.E. Dr. Álvaro Guião, a professora de ciências da escola, bolsistas de iniciação científica e a pesquisadora visitante. Pesquisas foram realizadas sobre o tema da água, análises foram realizadas da conta de água das residências dos alunos de cada turma; tabelas foram elaboradas com dados gerais do consumo de água nas residências de cada aluno e com os dados de todos dos alunos de cada turma; elaboraram uma planta baixa, com detalhamento do caminho da água em suas respectivas residências; visitação à Estação de Tratamento; montaram uma mini estação de tratamento; elaboraram atividades e jogos. Como resultado de todas essas atividades foi elaborado um jornal impresso e digital, utilizando-se de recursos multimídia. Os alunos demonstraram muito interesse e empenho durante as atividades, levando o conhecimento que adquiriram na escola aos seus familiares e amigos. A ideia de trabalhar com projetos é fazer com que o ensino das ciências seja mais divertido e estimular uma atitude mais inovadora na escola pública, capaz de formar desde cedo pensadores para problemas complexos.

Palavras-chave: Água. Ensino fundamental. Jornal digital.

Referências:

1 SANTANA, O.; FONSECA, A. **Ciências naturais:** quinta série e sexto ano. 2. ed. São Paulo: Saraiva, 2006.

IC9

Prospecção de linhagens bacterianas produtoras de biossurfactantes a partir de amostras de óleo de um reservatório off-shore brasileiro

CARVALHO, K. F.¹; CORREA, T.²; BOSSOLAN, N. R. S.²

kfreirec@hotmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes são moléculas microbianas de caráter anfipático que, acredita-se, tenham um papel ambiental relacionado à biodisponibilização de fontes de carbono insolúveis em água, o que as tornam de interesse para aplicações industriais, em particular para a recuperação avançada de petróleo (*Microbial Enhanced Oil Recovery*). (1) No presente trabalho, foram utilizadas amostras de óleo bruto proveniente de um reservatório *offshore* do Brasil como inóculo para cultivos aeróbios em meio LB Broth, com salinidades de 70 e 140 g/L de NaCl, incubados a 37°C. (2) Sete isolados foram obtidos, todos com 99% de semelhança com organismo do gênero *Bacillus*, com base no sequenciamento do gene 16S rDNA. Assim, foram realizados testes para investigar a influência das condições do meio de cultura e de incubação na produção de biossurfactante para um isolado específico, denominado O9-1. Nos cultivos com o isolado O9-1, foram testadas três temperaturas (37°, 55° e 80°C) e três salinidades (35, 70 e 140 g/L NaCl) em meio LB Broth e condições aeróbias sem agitação. A partir das alíquotas retiradas, foram realizadas medidas de absorvância (600 nm) para construção de curvas de crescimento e testes de emulsificação (E24) para avaliação da produção de biossurfactantes. O isolado O9-1 foi capaz de crescer e produzir biossurfactante nas condições mencionadas. Tanto o crescimento quanto a produção de biossurfactantes foram maiores a 37°C, com índices de emulsificação variando de 30% (35 g/L) a 51% (70 g/L). O aumento de temperatura, entretanto, acarretou aumento na demanda por sais, já que a 55° e 80°C o crescimento e a produção de biossurfactantes foram maiores na salinidade de 140 g/L. Em uma próxima etapa do trabalho será feita uma tentativa de purificação do surfactante produzido pelo isolado testado. Apoio financeiro PETROBRAS e IFSC.

Palavras-chave: Biossurfactante. Petróleo. Bactérias termofílicas.

Referências:

1 GUDIÑA, E. J. et al. Isolation and study of microorganisms from oil samples for application in enhanced oil recovery. **International Biodeterioration & Biodegradation**, v. 68, p. 56-64, 2012. doi: 10.1016/j.ibiod.2012.01.001.

2 DESAI, J. D.; BANAT, I. M. Microbial production of surfactants and their commercial potential. **Microbiology and Molecular Biology Review**, v. 61, n.1, p. 47-64, 1997.

IC10

Statistical features of neuronal avalanches and local field potentials

CARVALHO, M. M.¹; MOSQUEIRO, T. S.¹; MAIA, L. P.¹

milena.carvalho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Biological sensory networks rely on complex mechanisms of information processing to characterize external environments. In the presence of a stimulus, receptors transform these physicochemical data into trains of spikes which propagate through the sensory network. The possible activity patterns, which can be immensely rich, are known as neuronal avalanches and have been recorded in several biological systems in the last decade, both *in vitro* and *in vivo*. Surprisingly, the size and duration of these avalanches almost always take the form of power laws, what suggests that the collective dynamics of the units of the network can be related, in some way, to a phase transition. (1) More recently, it was shown that such behavior, observed in millisecond time scales, is correlated with another kind of neuronal scaling law, one recorded in the long-range temporal correlations present in psychophysical dynamics, like slow alpha oscillations, observed in the time scale of seconds up to hundreds of seconds. (2) However, so far there is no clear argument casually connecting these two phenomena. To sort this out, we are studying how the complex behaviour of ensembles of formal and realistic neurons give rise to critical avalanches and slow oscillations. It demands an improved understanding how local field potentials are affected by the avalanches, a non-trivial task. (3) Here we present the current steps of our statistical procedure and numerical workbench to (i) simulate a neural population with general properties, (ii) evaluate a coarse-grained measure supposed to be comparable with local field potential and finally (iii) extract from this signal both avalanche statistics and slow dynamics. We explored the parameter space of our model to assess different scenarios (synchronization, slow oscillations, etc) in both time scales.

Keywords: Criticality. Avalanches. Neuronal dynamics.

Referências:

1 MOSQUEIRO, T. S.; MAIA, L. P. Optimal channel efficiency in a sensory network. **Physical Review E**, v. 88, n. 1, p. 012712-1-012712-6, 2013.

2 POIL, S. S. et al. Critical-state dynamics of avalanches and oscillations jointly emerge from balanced excitation/inhibition in neuronal networks. **Journal of Neuroscience**, v. 32, n. 29, p. 9817-9823, 2012.

3 DEHGhani, N. et al. Avalanche analysis from multielectrode ensemble recordings in cat, monkey, and human cerebral cortex during wakefulness and sleep. **Frontiers in Physiology**, v. 3, p. 302-1-302-18. doi: 10.3389/fphys.2012.00302.

IC11

Introdução à teoria de grupos e suas aplicações em física

CONSOLE, F. C. C.¹; BERNARDES, E. S.¹

felipe.console@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo principal do projeto de pesquisa foi proporcionar-me um conhecimento básico da Teoria de Grupos para futuras aplicações em Física. Sendo assim, após a familiarização com os conceitos de grupos (discretos e contínuos), o programa era dar maior ênfase aos principais teoremas da Teoria de Representação usados em Física. A metodologia aplicada nesse processo de aprendizagem consistiu no estudo individual, feito em livros sobre Teoria de Grupos (1-3) e/ou Teoria de Representação, diálogos com o orientador afim de esclarecer algumas sutilezas e preparação e apresentação de seminários. Após o término do projeto, cujo período foi de um semestre, posso dizer que os principais objetivos foram alcançados, isto é, estudei e compreendi, por exemplo, os dois Lemas de Schur e as relações de ortogonalidade dos caracteres, resultados importantíssimos que nos ajudam a obter as representações irredutíveis de um grupo. Possíveis projetos de iniciação científica no futuro, que darão continuidade à esse, incluem a aplicação da Teoria de Grupos em Física do Estado Sólido, em especial, no estudo de invariantes topológicos.

Palavras-chave: Simetrias. Grupos. Física-matemática.

Referências:

- 1 CHEN, J.Q.; PING, J; WANG, G. **Group representation theory for physicists**. 2nd ed. Singapore: World Scientific, c2002.
- 2 TUNG, W. K. **Group theory in physics**. Singapore: World Scientific, 1985. 344 p.
- 3 JONES, H. F. **Representation theory and physics**. Bristol: Institute of Physics Publishing, 1998. 326 p.

IC12

PEER INSTRUCTION: uma metodologia ativa de aprendizagem para abordar o efeito fotoelétrico no Ensino Médio.

CORREIA, T. F. de A.¹; ZAGO, L.¹; BARROS, M. V.¹; BARROS, M. A.¹

thais.fernanda.correia@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A reforma curricular é um movimento que podemos constatar em diversos países, cujo destaque dirige-se das necessidades do conteúdo para as necessidades dos aprendizes, tornando-os ativamente engajados em situações de aprendizagem potencialmente relevantes para eles e que sejam percebidas como úteis e importantes para suas vidas.(1) No campo da Física esta tendência, quanto ao conteúdo, se verifica com o desenvolvimento de materiais didáticos e a introdução de tópicos de Física Moderna e Contemporânea no Ensino Médio. Em resposta a estas descobertas, muitas metodologias foram concebidas para melhorar a compreensão dos estudantes de Física, que vão desde modificações dos cursos tradicionalmente ministrados para uma completa reformulação dos mesmos. Nesta perspectiva foi desenvolvido na década de 1990 pelo Prof. Eric Mazur da Universidade de Harvard um método de ensino, denominado *Peer Instruction* (Instrução pelos Colegas), que visa modificar o formato das aulas tradicionais e incluir testes conceituais para promover a interação dos alunos e revelar suas dificuldades com o material instrucional.(2) A proposta didática apresentada nesse trabalho é sobre o efeito fotoelétrico utilizando-se da metodologia de Instruções pelos Colegas. Em sua implementação os estudantes têm a primeira exposição de conteúdo previamente a aula. As aulas são intercaladas com questões destinadas a expor dificuldades conceituais na compreensão do conteúdo que num primeiro momento são respondidas individualmente pelos alunos e depois discutidas entre os colegas na tentativa de chegar a um consenso sobre a resposta correta. As atividades propostas nesse trabalho foram implementadas por um grupo de 12 alunos do Curso de Licenciatura em Ciências Exatas do Instituto de Física da USP de São Carlos e bolsistas do Projeto de Iniciação à Docência (PIBID/CAPES) no ano de 2013 e as atividades foram realizadas com 28 alunos de escolas públicas (EE Sebastião de Oliveira Rocha e EE André Donatoni) em um minicurso. Os resultados mostraram que após a aplicação do *Peer Instruction*, a maior parte dos estudantes escolheram a resposta correta nos testes sobre o efeito fotoelétrico e tiveram um engajamento mais ativo com as atividades propostas em sala de aula, apontando que o número de respostas corretas aumentaram significativamente quando respondida entre os colegas. Sugerimos o *Peer Instruction* como uma metodologia que pode ser utilizada para o ensino de tópicos de Física Moderna e Contemporânea no Ensino Médio e que atende às demandas de inovação curricular do ponto de vista metodológico.

Palavras-chave: Física moderna e contemporânea. *Peer Instruction*. Efeito fotoelétrico.

Referências:

1 OSTERMANN, F.; MOREIRA, M. A. Uma revisão bibliográfica sobre a área de pesquisa "Física Moderna e Contemporânea no Ensino Médio". **Investigações em Ensino de Ciências**, Porto Alegre, v. 5, n. 1, p.23-48,2000.



2 MAZUR, E. **Peer instruction**: a user's manual. New Jersey : Prentice Hall, 1997. 253p.

IC13

Caracterização no estado sólido de fármacos antidepressivos: planejamento de novas formas cristalinas

COSTALONGA, M.¹; ELLENA, J. A.²; CARVALHO JUNIOR, P. S.²

marianecostalonga@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Novas formas de APIs apresentam propriedades farmacológicas e físico-químicas distintas fazendo o estudo e planejamento de novas formas sólidas importantes. (1) O presente trabalho mostra o planejamento e elucidação estrutural de novos sais de Paroxetina (PRX) e Sertralina (SRT). Foram obtidos as formas PRXNO₃, PRXSiF₆, PRXBr e SRTBr. (2) Foram realizadas determinação estrutural por Difração de Raio-X, análises térmicas e de solubilidade. O PRXNO₃ cristaliza num grupo espacial C2 eos demais sais no grupo espacial P21. O sal PRXBr é isoestrutural com sua respectiva forma cloreto. Os pontos de fusão e solubilidades obtidos para todos os compostos de PRX e SRT foram menores do que as respectivas formas cloreto. Essas diferenças se devem a diferentes configurações e conformações que os cristais adquirem durante o processo de cristalização, o que é de importante contribuição para o estudo e desenvolvimento desses novos fármacos. (3)

Palavras-chave: Antidepressivos. Paroxetina. Sertralina.

Referências:

1 STAHLY, G. P. Diversity in single- and multiple-component crystals. the search for and prevalence of polymorphs and cocrystals. **Crystal Growth & Design**, v. 7, n. 6, p.10007-1026, 2007.

2 YOKOTA, M.; UEKUSA, H.; OHASHI, Y. Structure analyses of two crystal forms of paroxetine hydrochloride. **Bulletin of the Chemical Society of Japan**, v. 72, n. 8, p. 1731-1736, 1999.

3 RAVIKUMAR, K.; SRIDHAR, K. B.; BHANU, M.N. Sertraline hydrochloride form II. **Acta Crystallographica E**, v. 62, p. o565-o567, 2006. doi:10.1107/S1600536806000730.

IC14

Avaliação do fotoenvelhecimento de pele por espectroscopia de fluorescência

D'ALMEIDA, C. P.¹; CAMPOS, C. P.¹; PRATAVIEIRA, S.¹

camila.paula.almeida@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A análise do tempo de vida da fluorescência em tecidos biológicos vem sendo apresentada como uma técnica com grande potencial para a caracterização tecidual com finalidade diagnóstica. Os fluoróforos de maior enfoque são o NADH (nicotinamida dinucleotídeo) e o FAD (flavina adenina dinucleotídeo), biomoléculas envolvidas na respiração celular e que, quando monitoradas, fornecem informação sobre o metabolismo da célula. (1) Uma das principais vantagens das técnicas ópticas de fluorescência para o diagnóstico é a possibilidade de avaliação do tecido *in situ*, sem a necessidade de remoção e processamento da amostra biológica. Por isso a fluorescência óptica é um dos métodos mais convenientes para aplicação clínica. Com o intuito de acompanhar o processo de fotoenvelhecimento da pele em modelo animal, foram feitas medidas de espectro e tempo de vida de fluorescência em três regiões da pele de camundongos *hairless* com diferentes idades e tempo de exposição ao UV. O sistema de tempo de vida de fluorescência foi calibrado com medidas de uma solução de rodamina, uma molécula padrão. Os espectros de fluorescência medidos mostraram que a intensidade da fluorescência da pele envelhecida é igual àquela medida em peles que não receberam dosagens de ultravioleta. No entanto, a intensidade de fluorescência é maior na pele fotoenvelhecida quando essa é comparada com a pele que não recebeu UV. Já as medidas de tempo de vida de fluorescência evidenciam o aumento de NADH ligado e FAD livre, isso porque houve um aumento no tempo de vida longo de cada um desses fluoróforos.

Palavras-chave: Espectroscopia. Fluorescência. Fotoenvelhecimento.

Referências:

1 SKALA, M. C. et al. . In vivo multiphoton microscopy of NADH and FAD redox states, fluorescence lifetimes, and cellular morphology in precancerous epithelia. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 104, n. 49, p.19494 - 19499, 2007.

IC15

Clonagem e expressão da proteína Meg15 de *Schistosoma Mansoni*

FELIZATTI, A. P.¹; ORCIA, D.²; DE MARCO, R.²

apfelizatti@gmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

²Instituto de Física de São Carlos - USP

A esquistossomose é uma doença parasitária causada por trematódeos digenéticos sanguíneos, com enorme importância socioeconômica mundial, principalmente em regiões tropicais, sendo considerada uma das Doenças Tropicais Negligenciadas (NTDs) ocorrendo mais de 240 milhões de pessoas infectadas no mundo, sendo a segunda parasitose mais devastadora, atrás apenas da Malária (1). A doença causa milhares de óbitos anuais segundo dados da OMS (2). O projeto objetiva explorar a estrutura e realizar a expressão heteróloga da proteína em questão, que está inserida dentro do projeto de estudo das proteínas codificadas por *MEGs* que vem sendo desenvolvido dentro do grupo do prof. DeMarco. Acredita-se que os produtos protéicos de *MEGs* estejam envolvidas no mecanismo de escape do parasita *Schistosoma mansoni* perante ao sistema imune do hospedeiro em casos de esquistossomose (3). Inicialmente, foi utilizado RNA mensageiro extraído de vermes adultos de *S. mansoni* para realização de transcriptase reversa, e o cDNA obtido foi amplificado via PCR. Confirmada a obtenção do DNA complementar, este foi ligado ao plasmídeo pGEM, e a construção transformada em cepas de DH5-alfa de *E. coli*, seguida de plaqueamento com antibióticos seletivos em meio LB. As colônias positivas foram cultivadas e seus plasmídeos extraídos. Os clones obtidos foram enviados para sequenciamento, resultando na confirmação da obtenção do cDNA de interesse. Este cDNA foi então subclonado no vetor pET29A e transformadas em *E. coli*. Diferentes testes de expressão e purificação utilizando diversos tampões, detergentes e ensaios cromatográficos de purificação foram realizados afim de otimizar a expressão em quantidade e pureza. Foram realizados análises de predição estrutural via softwares de bioinformática, experimentos de Espectrometria de massas, que confirmou a obtenção da proteína de interesse, e Dicroísmo circular, que foi inviabilizado devido a alta instabilidade observada para esta proteína, o sugere que a mesma possa estar interagindo com membranas através da hélice anfipática presente em sua estrutura, de acordo com a predição via bioinformática. Novos estudos são necessários para aumento da estabilidade para viabilizar outros ensaios.

Palavras-chave: Expressão heteróloga. Micro-éxon genes. *Schistosoma mansoni*.

Referências:

1 BRITO, G. **Saiba mais sobre a esquistossomose**. Disponível em : <<http://www.fiocruz.br/ioc/cgi/cgilua.exe/sys/start.htm?infoid=1493&sid=32>>. Acesso em: 20 jun. 2013.

2 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Schistosomiasis**. Disponível em :

<<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs115/en/>>. Acesso em: 20 jun. 2013.

3 DEMARCO, R. et al. Protein variation in blood-dwelling schistosome worms generated by differential splicing of micro-exon gene transcripts. **Genome Research**, v. 20, n. 8, p. 1112-1121, 2010.

IC16

Análise da especificidade da interação entre o fator de alongação específico para selenocisteínas (SelB) com mutantes do tRNA^{Sec} de *Escherichia coli*

FERNANDES, A. F.¹; SERRÃO, V. H. B.¹; MANZINE, L. R.¹; THIEMANN, O. H.¹

adriano.fernandes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A compreensão de processos de tradução do código genético é imprescindível para esclarecer o papel central no metabolismo celular dessas vias bioquímicas. Em particular, o estudo da via de síntese de novos aminoácidos, como a selenocisteína e a pirrolisina, que resultam na expansão do código genético dos 20 aminoácidos convencionalmente estudados para um total de 22 aminoácidos. A selenocisteína (Sec, U) é um aminoácido que representa a principal forma biológica do elemento selênio e sua incorporação é um processo co-traducional em selenoproteínas como resposta ao códon UGA em fase e requer uma complexa maquinaria molecular distinta para três domínios da natureza. (1-2) O repertório completo de genes envolvidos nessa via de síntese em procarionotos é conhecido, porém algumas das interações moleculares ainda não foram esclarecidas. (3) Este projeto visa à caracterização molecular das interações entre o Fator de Elongação específico para incorporação de selenocisteínas (SelB) de *Escherichia coli* com diferentes mutantes do tRNA^{Sec} específico, afim de compreender a sua especificidade e as regiões responsáveis pelo reconhecimento e especificidade dessa interação. Para isso, medidas de Espectroscopia de Anisotropia de Fluorescência (FAS) e Técnicas de Microcalorimetria como Calorimetria de Titulação Isotérmica (ITC) e Calorimetria de Varredura Diferencial (DSC) serão utilizadas para determinação das constantes de interação desses complexos proteína-tRNA. Os estudos propostos irão auxiliar no entendimento do mecanismo de incorporação e de especificidade do tRNA para este aminoácido em bactérias bem como nos demais domínios da vida além de possibilitar um aumento na compreensão de complexos do tipo proteína-tRNA.

Palavras-chave: Selenocisteínas. Interação proteína-tRNA. Técnicas físicas.

Referências:

- 1 BURBAUM, J. J.; SCHIMMEL, P. Structural relationship and the classification of aminoacyl-tRNA synthetase. **Journal of Biological Chemistry**, v. 266, n. 26, p. 16965-16968, 1991.
- 2 CUSACK, S. Aminoacyl-tRNA synthetase. **Current Opinion Structural Biology**, v. 7, n. 6, p. 881-889, 1997.
- 3 ENGELHARDT, H.; FORCHHAMMER, K.; MÜLLER, S.; GOLDIE, K. N.; BÖCK, A. Structure of selenocysteine synthase from *Escherichia coli* and Location of tRNA in the Seryl-tRNA^{Sec}-enzyme complex. **Molecular Microbiology**, v 6, n. 23, p. 3461-3467, 1992.

IC17

Desenvolvimento de recursos multimídia utilizando a água como tema gerador de projeto multidisciplinar no ensino fundamental II

FERNANDES, L. G.¹; COLNAGO, N. A.S.¹; MASCARENHAS, Y. P.¹; CORDEIRO, A. M.²

leticia.gliardin.fernandes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Estudos Avançados - USP

A Organização das Nações Unidas propôs o ano de 2013 como o Ano Internacional da Cooperação pela Água. A preservação e acesso à água potável e o saneamento básico são fundamentais para a sobrevivência humana. Um projeto multidisciplinar intitulado Água: cooperação para manter a vida imprimiu diversas ações para inserir a discussão no ambiente escolar da Escola Estadual Jesuíno de Arruda, localizada na cidade de São Carlos/SP. Os participantes foram 120 alunos de três turmas de 7^{os} anos do Ensino Fundamental II, os professores das disciplinas de ciências, geografia e língua portuguesa, os bolsistas (IEA/PROEX/USP) e a pesquisadora visitante IEA/SC/USP. Diversas modalidades de atividades foram realizadas nas três disciplinas e abrangeram pesquisas sobre a disponibilidade e uso da água, principais rios, mananciais, esgoto e escoamento do município de São Carlos e como ocorre a urbanização e o fornecimento de água nesse município. Após as pesquisas realizadas em cada disciplina que culminaram com produções de textos, crônicas, poemas, cruzadinhas, desenhos e histórias em quadrinhos (HQ) estas produções foram formatadas com objetos multimídias como PowerPoint®, Haguê® e outras, além de captura de imagens da Internet que foram ensinadas aos alunos com o objetivo de as utilizarem para compor um jornal impresso e eletrônico onde os resultados de todas as atividades desenvolvidas foram divulgadas. Os alunos participaram ativamente das diversas atividades. Os dados também mostraram que eles desenvolveram atitudes para que possam ampliar a consciência sobre as questões relativas à água e assumirem de forma independente e autônoma ações e valores voltados à sua proteção e conservação. O uso das ferramentas multimídias foi estimulador para os alunos que se empenharam no decorrer das atividades no laboratório de informática.

Palavras-chave: Multidisciplinaridade. Multimídia. Ensino fundamental .

Referências:

1 BRASIL. Ministerio da Saude. Portaria nº 518/GM de 25 de março de 2004. **Estabelece os procedimentos e responsabilidades relativos ao controle e vigilância da qualidade da água e consumo humano e seu padrão de potabilidade, e dá outras providencias..** Disponível em:<<http://dtr2001.saude.gov.br/sas/PORTARIAS/Port2004/GM/GM-518.htm>>. Acesso em: 21 ago.2014.

IC18

Optimization of the CTA array

LANG, R. G.¹; SOUZA FILHO, L. V.¹

rodrigo.lang@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The present generation of Cherenkov telescopes has in recent years been a powerful tool to the study of gamma-ray astronomy in the energy range above a few tens of GeV. It made possible the study of several mechanisms that were otherwise inaccessible and the discovery of new sources with emission in the range of TeV. The revolution in the understanding of these mechanisms and sources is noticed in the increased number of publications in the area. The Cherenkov Telescope Array (1) is an international collaboration of 27 countries and above 500 researchers that aims to build the next generation of ground-based gamma-ray astronomy. While the most important experiments in progress are arrays of about 5 telescopes, such as H.E.S.S. or VERITAS, the CTA will have about 100 telescopes. This will improve the performance of the observatory, which will have unprecedented sensitivity, angular resolution and detection threshold. The aims of the CTA can be roughly grouped into three main themes: the origin of cosmic rays and their role in the Universe, the nature and variety of particle acceleration around black holes and the search for the ultimate nature of matter and physics beyond the Standard Model. This work takes part in these efforts and aims to develop a mathematical approach to the optimization of the array, which have direct influence in the observatory's performance. Two main algorithms were developed. The first one is based on potential fields (2) and the trigger probability of the telescope is used to calculate the potential of interaction. The second one is a thermodynamical algorithm and uses the intersection areas for the optimization. Preliminary analysis were made to find the best initial conditions and 6 arrays of 6 telescopes were chosen for each algorithm. Now a full simulation of a large number of air showers and the response of the telescope optics and electronics to them is being run, using the CORSIKA and sim_telarray packages. These simulations generate the same output that will be generated by the observatory and these data are analysed using the EVNDISP package. Both algorithms gave reasonable outputs with a low computational cost and the first results for the simulations show that some of the arrays proposed by this work might have a better sensitivity than the one proposed by the ASTRI project (3) for an energy of 1 TeV.

Keywords: Cherenkov. Optimization. Gamma-ray astronomy.

Referências:

1 CTA Consortium. Design concepts for the Cherenkov Telescope Array. **Experimental Astronomy**, v 32, p 193-316, 2011. doi: 10.1007/s10686-011-9247-0.

2 HOWARD, A.; MATARIC, M; SUKHATME, G. Mobile sensor network deployment using potential fields: a distributed, scalable solution to the area coverage problem. In: ASAMA, H. et al.(Ed.). **Distributed autonomous robotic systems 5**. Japan: Springer Verlag, 2002. cap. 8,p. 299-308. doi:

10.1007/978-4-431-65941-9_30.

3 BIGONGIARI, C. et al. Expected performance of the ASTRI-SST-2M telescope prototype. In: INTERNATIONAL COSMIC RAY CONFERENCE, 33rd, 2013, Rio de Janeiro, Brasil. **Proceedings...**Rio de Janeiro: CBPF, 2013.

IC19

Síntese e caracterização de nanopartículas metálicas revestidas com sílica e funcionalizadas com fluoróforos para aplicação em medicina

LEITE, A. E. T.¹; ZUCOLOTTI, V.²; MARANGONI, V. S.²

anatognoli@hotmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Nanopartículas têm sido amplamente investigadas na produção de ferramentas a nível molecular que possam ser úteis para diversas aplicações como identificação e tratamento de doenças. Especificamente, nanopartículas metálicas, entre elas nanopartículas de ouro, possuem propriedades óticas e eletrônicas diferenciadas, exibindo uma banda de ressonância plasmonica que vai do visível ao infravermelho próximo, dependendo de sua forma e tamanho, permitindo, por exemplo, sua utilização em fototerapia para eliminação seletiva de células cancerígenas. (1) Quando se trata de aplicações biológicas de nanopartículas metálicas, o revestimento adequado tem um papel importante na proteção destes materiais contra degradações químicas e oxidações. (2) Entre os possíveis revestimentos, a sílica apresenta muitas vantagens, como biocompatibilidade, inércia química, além de ser opticamente transparente. (2) Além disso, a utilização eficiente de nanomateriais no diagnóstico e tratamento de câncer requer que estas partículas se alojem especificamente na região de interesse. A modificação da superfície das nanopartículas com agentes químicos de reconhecimento como proteínas e anticorpos específicos, (3) é uma estratégia que pode permitir este direcionamento, uma vez que estas moléculas identificam grupos complementares na superfície de células característicos de câncer. Por exemplo, a transferrina (TF) tem chamado muito atenção devido a elevada expressão de receptores de transferrina (TFR) por células cancerígenas se comparada com células saudáveis. A funcionalização destes sistemas com Isotiocianato de fluoresceína (FITC) permite, ainda, uma melhor visualização das nanopartículas durante a caracterização já que ele é um composto fluorescente e comprimento de onda específico e de fácil visualização.

Palavras-chave: Nanopartículas. Nanomedicina. Fluoresceína.

Referências:

1 SPERLING, R. A. et al. Biological applications of gold nanoparticles. **Chemical Society Reviews**, v. 37, n. 9, p. 1896-1908, 2008.

2 UNG, T.; LIZ-MARZAN, L. M.; MULVANEY, P. Controlled method for silica coating of silver colloids. influence of coating on the rate of chemical reactions. **Langmuir**, v. 14, n. 14, p. 3740-3748, 1998.

3 YANG, L. L. et al. Single chain epidermal growth factor receptor antibody conjugated nanoparticles for in vivo tumor targeting and imaging. **Small**, v. 5, n. 2, p. 235-243, 2009.

IC20

A nanotecnologia representada por meio de desenhos: um estudo com alunos do ensino fundamental

LICIO, J. G.¹; LOURENÇO, A. B.²

jose.licio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Neste trabalho, investiga-se a mudança de concepção de alunos da Educação Básica sobre o tema Nanotecnologia, a partir da apresentação de um minicurso não-formal sobre o tema. Como metodologia de análise da mudança conceitual dos alunos após a intervenção didática os alunos elaboraram desenhos sobre suas concepções em relação à nanotecnologia. Optou-se por trabalhar com desenhos, pois esta ferramenta é uma forma importante de expressão para comunicar naturalmente os pensamentos a respeito de um determinado tema e vem sendo utilizada em diferentes pesquisas com propósitos similares. (1-3) Para a análise, dividimos os desenhos coletados em 10 categorias referentes aos elementos presentes: "Em branco", "Representação de aparelhos eletrônicos", "Representação de peças robóticas", "Uso de linguagem escrita no espaço do desenho", "Representação de objetos em diferentes escalas", "Representação de átomos e moléculas", "Desenhos não identificáveis", "Representação de presença humana", "Representação do uso de microscópios" e "Representação da aplicação da nanotecnologia na medicina". A análise dos desenhos iniciais e finais revelou que inicialmente boa parte dos alunos desconheciam o termo Nanotecnologia, já após a intervenção didática nenhum aluno alegou desconhecer sobre esta área do conhecimento, e, além disso, os desenhos finais faziam referências a diferentes aspectos da nanotecnologia abordado no minicurso. Embora o desenho possa limitar aos alunos expressarem todo seu conhecimento sobre o assunto o uso desta ferramenta como instrumento de avaliação possibilitou que de uma maneira lúdica os alunos representassem o conhecimento de maior destaque para eles sobre a temática. As informações colaboraram para que o palestrante direcionassem a apresentação do minicurso de maneira mais efetiva com base nos resultados das concepções iniciais dos alunos e que avaliasse sua apresentação e o minicurso com base nas concepções dos alunos após o minicurso.

Palavras-chave: Nanotecnologia. Desenhos. Minicurso.

Referências:

1 CHAGAS, M. S.; STUDART, D. C.; VIEIRA, A. C. M.; FARIA, A. C. G.; AMARAL, A. L.; COSTA, P. N.; SOARES, N. F. Museus e público jovem: percepções e receptividades. **Revista Eletrônica do Programa de Pós-Graduação em Museologia e Patrimônio**, v. 3, n. 1, p. 49-66, 2010.

2 STUDART, D. C. Conhecendo a experiência museal das crianças por meio de desenhos. In: MASSARANI, L. (Ed.). **Ciência e criança**: a divulgação científica para o público infanto-juvenil. Rio de Janeiro: Museu da Vida, 2008. p. 20-31.

3 REIS, P.; RODRIGUES, S.; SANTOS, F. Concepções sobre os cientistas em alunos do 1º ciclo do ensino básico: poções, máquinas, monstros, invenções e outras coisas malucas. **Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias**, v. 5, n. 1, p. 51-74, 2006.

IC21

Development of a processing tool for magnetic resonance spectroscopy data using Krilov basis method diagonalization

LIMA, T. S.¹; SILVA, D. M. D. D.¹; PAIVA, F. F.¹

thalessinelli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The Fourier analysis has a record of success in signal processing, although there are several situations where it does not yield the desired results. In order to overcome this problem, many methods were proposed in recent years; among others, the KBDM has shown its potential, especially in MRS. (1-3) This method has been approached before by some of our group researchers and we are working on the evaluation and validation of the method with the prospect of obtaining an alternative tool for processing and analysis of MR clinical spectra in addition to seeking solutions to problems related to the acquisition of metabolic levels in response to brain activity. Preliminary results on the matter reveal that the KBDM is a promising alternative to resolve overlapping components. (1,3) Unfortunately, progress has been barred due to a lack of proper tools to analyze several spectra data quickly. Furthermore, the past implementation required the purchase of commercial software licenses. Thus, our work focuses on creating an accessible graphical platform capable of handling simulation and processing of many spectral data simultaneously. Furthermore, to remove the need of commercial software, all the implementation was made using Python and its third-party libraries. The final interface is now intuitive and capable of simulating and processing many MRS signals simultaneously.

Keywords: KBDM. Magnetic resonance. Signal processing.

Referências:

1 SILVA, C. M. P. **KBDM como ferramenta para processamento de sinais de espectroscopia por ressonância magnética**. 2013. 161 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

2 MAGON, C. J. **A inversão harmônica do espectro de ressonância magnética: uma solução para o problema dos autocampos**. 2007. 148 p. Tese (Livre Docência) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

3 MANDELSHTAM, V. A. FDM: the filter diagonalization method for data processing in NMR experiments. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 38, n. 2, p.159-196, 2000.

IC22

Álgebra linear e aplicações á física: geradores de dinâmica

MARTINELLI, T.¹; VEIGA, P. A. F.²

tiago.martinelli@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

A análise de modelos dinâmicos tais como modelos Hamiltonianos é ferramenta básica para a compreensão de diversos sistemas de muitas áreas da Física Teórica. As Mecânicas: Clássica e Quântica, a Mecânica Estatística Clássica, a Teoria de Campos Euclidiana e a Física da Matéria Condensada são exemplos de áreas de pesquisa com problemas que tem como ingrediente básico a obtenção direta ou indireta de informações referentes ao espectro de operadores geradores da dinâmica; operadores Hamiltoniano/Energia H e/ou outros operadores a ele relacionados. Precisamente, estes operadores correspondem a geradores de semigrupos de evolução no tempo, ou generalizações destes, e seus comportamentos determinam propriedades físicas relevantes. Como exemplo, temos o papel fundamental desempenhado pela determinação do autovalor principal (e a degenerescência associada) da matriz de transferência T que tem papel central no estudo da estrutura de fases (bifurcações) de cadeias de spin e/ou teorias Euclidianas definidas em redes espaço-temporais (reticulados). Visando a teoria de semigrupos e seus geradores, o trabalho se concentrou num estudo mais aprofundado de Álgebra Linear Aplicada, utilizando como referência a versão abreviada do livro clássico de Kato (1), seguido de uma introdução a Mecânica Quântica, representação de Schrödinger e sua equação de evolução, como guia usamos a apresentação moderna que aparece em Sakurai (2) e em Mecânica Estatística, como a solução de Onsager (modelo de Ising), tendo como referência o livro de Huang. (3) Polarizamos o trabalho na análise espectral de operadores em espaços de dimensão finita. Como resultado principal de nosso trabalho, constatamos que, por exemplo, os operadores: $U(t, t') = e^{-iH(t'-t)}$ (operador evolução temporal); $T = e^{-\epsilon H}$ (matriz de transferência); em que o primeiro promove a evolução de um estado quântico com energia H independente do tempo, num tempo t para um tempo posterior t' e o segundo promove a evolução para o modelo de Ising-1d, sendo H o hamiltoniano quântico e ϵ o valor da malha da rede "temporal". Pelo desenvolvimento matemático abordado, de fato formam um semigrupo, com gerador dado pelo hamiltoniano/energia H . Além disso, conhecida a autobase do gerador, podemos resolver qualquer problema de valor inicial, quando decompomos o operador de evolução (diagonalizável) na base do próprio hamiltoniano. Vendo assim, o papel do espectro do gerador na dinâmica da equação. Vimos portanto, que por trás de equações que geram dinâmicas em modelos físicos, podemos definir operadores dessas e de modo mais preciso através do formalismo matemático dado pela teoria de semigrupos, mostrar suas propriedades e condições que devem satisfazer.

Palavras-chave: Álgebra linear. Semigrupos. Geradores de dinâmica.

Referências:

- 1 KATO, T. **A short introduction to perturbation theory for linear operators**. New York: Springer, 1982.
- 2 SAKURAI, J. J. **Modern quantum mechanics**. Boston: Addison-Wesley, 2011.
- 3 HUANG, K. **Statistical mechanics**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1963.

IC23

Produção de nanocristais semicondutores core-shell de CdSe/ZnS baseados em quantum dots

MARTINS, N. Z.¹; HERNANDES, A. C.²; BERNARDI, M. I. B.²

nicolizunti@gmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Devido ao crescente interesse científico e tecnológico na área de nano, cujas recentes descobertas têm favorecido as mais diversas áreas da ciência(1) esse trabalho visa à produção de nanocristais caroço-casca de CdSe/ZnS que tem função de semicondutores baseados em pontos quânticos usados em dispositivos ópticos como diodos de emissão de luz, LEDs.(2) Neste trabalho foram sintetizados os precursores necessários para a síntese de CdSe pelo método de Huaipeng Su e colaboradores (3) utilizando um sistema de hidrotermalização acoplado a um forno de micro-ondas doméstico. Foram preparados dois precursores, um de cádmio utilizando CdO que foi preparado utilizando um método convencional, e um de selênio dissolvido em um reagente com fosfina que realiza um ataque ácido base, atuando como uma base de Lewis, e o Se livre, um ácido de Lewis, formando o precursor límpido.

Palavras-chave: Pontos quânticos. Nanocristais. Semicondutores.

Referências:

1 SILVA, F. O. et al. O estado da arte da síntese de semicondutores nanocristalinos coloidais. **Química Nova**, v. 33, n. 9, p. 1933-1939, 2010.

2 GERBEC, J. A. et al. Microwave-enhanced reaction rates for nanoparticle synthesis. **Journal of American Chemical Society**, v. 127, n. 45, p. 15791-15800, 2005.

3 SU, H. et al. Microwave synthesis of nearly monodisperse core/multishell quantum dots with cell imaging applications. **Nanoscale Research Letters**, v. 5, n. 3, p. 625-630, 2010.

IC24

Estudos estruturais e funcionais de hidrolases de glicosídeos das famílias 18 e 105, com potencial na despolimerização da biomassa lignocelulósica

MENDONÇA, D. C.¹; BERNARDES, A.¹; MUNIZ, J. R. C.¹

deborah.mendonca@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Alternativas eficazes de produção energética é um elemento indispensável ao ser humano na atual sociedade e, a utilização da biomassa lignocelulósica na produção de biocombustíveis de segunda geração, pode ser uma delas. Todavia, a hidrólise enzimática atualmente empregada na sacarificação da biomassa é dificultada pela considerável recalcitrância da parede celular.(1) Para que essa tecnologia se torne sustentável e economicamente viável, um entendimento em âmbito atômico-molecular da hidrólise enzimática da biomassa faz-se necessário. Adicionalmente, existe ainda uma grande escassez de caracterização estrutural dessas enzimas, o que é desarmônica com a grande importância biotecnológica das mesmas. O emprego de métodos científicos modernos em enzimologia e cristalografia de macromoléculas, aliados a estudos biofísicos e bioquímicos poderão conduzir à uma compreensão mais aprofundada da hidrólise da biomassa vegetal. Nesse contexto, o atual projeto de pesquisa propõe a caracterização da atividade enzimática, além da resolução das estruturas tridimensionais por cristalografia de raios-X, de hidrolases de glicosídeos das famílias 18 e 105 (GH18 e GH105, respectivamente).(2) Para isso, as GH18 e GH105 foram clonadas em vetores de superexpressão em bactérias *E. coli*. Os ensaios de expressão e purificação foram conduzidos a fim de isolarmos as enzimas de interesse e, conduzirmos os experimentos de cristalização, em conjunto com estudos funcionais e biofísicos. As informações estruturais e funcionais das hidrolases de glicosídeos alicerçarão estudos de mutagênese sítio-dirigida visando a produção de enzimas e coquetéis providos de melhores propriedades hidrolíticas que poderão ser empregados em biorrefinarias. O sucesso desses estudos darão sua contribuição para que o Brasil se firme como um líder na produção de bioenergia sustentável e amigável ao meio ambiente. Paralelamente, uma enzima caracterizada como lípase, com uma possível função esterase, foi expressa e está em processo de purificação. Além de seu potencial biotecnológico, o trabalho com essa enzima irá complementar o aprendizado nas técnicas utilizadas.

Palavras-chave: Bioenergia. Cristalografia. Biotecnologia.

Referências:

1 OGEDA, T. L.; PETRI, D. F. S. Hidrólise enzimática de biomassa. **Química Nova**, v. 33, n. 7, p. 1549-1558, 2010.

2 LOMBARD, V. et al. The carbohydrate-active enzymes database (CAZy) in 2013. **Nucleic Acids Reserach**, v. 42, n. D1, p. D490-D495, 2014.

IC25

Evolução temporal de uma quase-partícula

MIKUNI, V. M.¹; OLIVEIRA, L. N. de¹

vinicius.mikuni@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) se mostrou uma ferramenta bastante eficaz em diversas áreas da Física e da Química devido aos trabalhos de Hohenberg e Kohn. (1) Uma de suas aplicações de grande interesse físico é o teorema de Runge e Gross (2) que descreve a evolução temporal da densidade de um sistema. Esta área é conhecida como Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT). Mesmo sendo mais recente quando comparada a DFT, apresenta resultados de muita importância (3), resolvendo problemas físicos que seriam mais complicados por outros métodos. O objetivo deste projeto é utilizar a TDDFT para resolver um problema simples, que se baseia em um elétron situado em um gás de elétrons unidimensional, analisando sua evolução temporal e espacial.

Palavras-chave: TDDFT. DFT. Sistema correlacionado.

Referências:

1 HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. **Physical Review B**, v.136, n.3, p.864, Nov.1964.

2 KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. **Physical Review A**, v.140, n.4, p.1133, Nov.1965.

3 LI, Z. et al. Correlated dynamics of the motion of proton-hole wave packets in a photoionized water cluster. **Physical Review Letters**, v.110, p.038302, 2013. doi:10.1103/PhysRevLett.110.038302.

IC26

Microscopia óptica com sistema emissor de luz à base de LED-RGB

NAVASCUES, F. F.¹; WEIS, P. T.²; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹; BAGNATO, V. S.¹

felipe.navascues@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centro Universitário Central Paulista - UNICEP

A microscopia óptica (1) convencional utiliza uma fonte de luz branca para observar a imagem formada. As lâminas histológicas, normalmente, são coradas com o corante HE (hematoxilina e eosina), a fim de melhorar a visualização. No entanto, alguns detalhes e estruturas não são totalmente visíveis usando essa combinação de corante HE e luz branca, assim uma alternativa é a utilização de cores (2), tais como o azul, o vermelho e o verde (ou RGB do inglês: Red, Green e Blue). A mudança na proporção dessas três cores foram outras cores, inclusive o branco. A análise de lâminas histológicas em diferentes padrões iluminações será feita usando um microscópio óptico equipado com luz LED RGB, de modo a obter um melhor contraste. As imagens são obtidas através de uma câmera, neste caso, um iPod (Apple, Califórnia, Estados Unidos).

Palavras-chave: Microscopia. Histopatologia. LED-RGB.

Referências:

1 STEPHANIDES, T. **The microscope and the practical principles of observation**. London: Faber and Faber, 1947.

2 OLIVER, C. W. **The intelligent use of the microscope**. 2nd ed. London: Chapman and Hall, 1951.

IC27

Processing of graphene oxide and conjugated polymers for wastewater trace metal treatment

NOGUEIRA, V. H. R.¹; SANTOS, F. A.¹; NOGUEIRA, P. F. M.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

victor.nogueira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

One of the main problems faced by humankind over the centuries is related to its water resources, from its availability to its consumption. It is known that the presence of heavy metals in water has become a substantial problem due to the incorrect disposal of the effluents. Despite the increased use of activated carbon for water treatment and metal removal, this is still a high-cost method. Graphene is currently one of the hot-topics in nanostructured materials, and have found applications in a number of technological and environmental areas. In this study we propose the fabrication of beads (1) containing chitosan/graphene (2) oxide/algal polysaccharide (PLS) for application in water treatment and metal removal. (3) The beads were fabricated via co-precipitation, upon adding the GO and PLS to a chitosan solution. The ability of the beads to capture and remove metal ions was evaluated upon incubating them in a Cu solution at concentration of 10^{-5}mol.L^{-1} under stirring. The beads could capture Cu ions in a very efficient manner. Next steps include the optimization of beads fabrication and ability to chelate other metal ions.

Keywords: Graphene oxide. Wastewater treatment. Trace metal.

Referências:

- 1 AHMED, A. E. S. et al. Natural and synthetic polymers for water treatment against dissolved pharmaceuticals. **Journal of Applied Polymer Science**, v. 131, n. 13, p. 40458-1-40458-10, 2014.
- 2 BABEL, S.; KUMIAWAN, T. A. Low-cost adsorbents for heavy metals uptake from contaminated water: a review. **Journal of Hazardous Materials B**, v. 97, n. 1-3, p. 219-243, 2013.
- 3 CAMARILLO, R. et al. Removal of heavy metal ions by polymer enhanced ultrafiltration: Batch process modeling and thermodynamics of complexation reactionst. **Desalination**, v. 286, p.193-199, 2012. doi: 10.1016/j.desal.2011.11.021.

IC28

Study about acid-alkaline transition meta-hemoglobin AMAZON'S-TURTLE (*Podocnemis Expansa* Schweigger) (Testudines, Podocnemididae) using spectroscopic methods

OLIANI, F. H.¹; NASCIMENTO, O. R.¹

fabio.oliani@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Hemoglobins are proteins whose primary function is to carry oxygen through the bloodstream. When exposed to acidic and alkaline media, the hemoglobin has different light absorption characteristics. (1-2) Study the acid-alkaline transition of methaemoglobin TURTLE-DA-AMAZON using UV-Vis spectroscopy is the objective of this work.

Keywords: Turtle. Methaemoglobin. Amazon.

Referências:

1 BRUNORI, M. et al. The transition between 'acid' and 'alkaline' ferric heme proteins. **Biochimica et Biophysica Acta (BBA): Protein Structure**, v. 154, n. 2, p. 315-322, 1968.

2 SHIBATA, T. et al. Characterization of the acid-alkaline transition in the individual subunits of human adult and foetal methaemoglobins. **Journal of Biochemistry**, v. 148, n. 2, p. 217-229, 2010.

IC29

Analysis of the effect of mutations in SEPT3 on SEPT3-SEPT7 interaction

PALMA FILHO, N. B.¹; MACEDO, J. N. A.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹

nicolaupalma@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septins belong to the GTPase family. They were firstly identified in yeast, but there are many representatives in eukaryotes, except plants. Septins are filamentous proteins which act in several cellular functions assembling highly organized complexes and structures. (1) Aiming to elucidate the factors involved in stabilization of the interactions between septins in the formation of these complexes, we propose to analyze the effects of mutations in SEPT3 on the SEPT3-SEPT7 interaction. Five mutants were analyzed, three of them being on the G interface and two on the NC interface. (2) Only the mutant SEPT3S179D interfered on the dimer SEPT3-SEPT7 formation, suggesting that the interaction between these proteins occurs via the G interface. On the other hand, the mutation T282Y was thoroughly favorable to the interaction between two dimers SEPT3-SEPT7, via SEPT3. The mutant SEPT3T181D destabilized the interaction between two dimers, being a promising alternative to block the polymerization of octameric complexes of septins which have the SEPT3 in their composition. (3)

Keywords: Septins. Interaction. Mutation.

Referências:

1 CAO, L.; YU, W.; WU, Y.; YU, L. The evolution, complex structures and function of septin proteins. **Cellular Molecular Life Sciences**, v. 66, n. 20, p. 3309-3323, 2009.

2 MACEDO, J. N. A.; VALADARES, N. F.; MARQUES, I. A.; FERREIRA, F. M.; DAMALIO, J. C.; PEREIRA, H. M.; GARRATT, R. C.; ARAÚJO, A. P. U. The structure and properties of Septin 3: a possible missing link in septin filament formation. **Biochemical Journal**, v. 450, part 1, p. 95-105, 2013.

3 SANDROCK, K.; BARTSCH, I.; BLASER, S.; BUSSE, A.; BUSSE, E.; ZIEGER, B. Characterization of human septin interactions. **Biological Chemistry**, v. 392, n. 8-9, p. 751-761, 2011.

IC30

Propriedades elétricas de materiais híbridos com alta transparência derivados de GPTS:TEOS/PEDOT:PSS preparados via processo sol-gel

QUADROS, M. H.¹; GOZZI, G.¹; DONATTI, D. A.¹; VICENTE, F. S.¹

matheus_mhq@hotmail.com

¹Universidade Estadual Paulista - UNESP Rio Claro

Dispositivos optoeletrônicos necessitam de ao menos um eletrodo transparente. Normalmente, tais eletrodos transparentes são produzidos com filmes de óxido de índio-estanho (ITO) pela técnica RF-Sputtering de deposição. Estes eletrodos comerciais possuem resistência de folha da ordem de 60 ohms/sq e transmitância óptica da ordem de 80 % em 550 nm. O polímero poli(3,4-etileno dioxitiofeno):poliestireno sulfonado (PEDOT:PSS) é um material alternativo para fabricação de eletrodos transparente devido a sua alta condutividade (de até 1000 S/cm) e solubilidade em água. (1) Materiais condutores e solúveis exibem vantagens de processamento pra a fabricação de eletrodos, entretanto como desvantagem para a fabricação de dispositivos opto-eletrônicos, estes materiais apresentam significativa absorção de luz visível e não se pode depositar sobre estes eletrodos materiais solúveis em determinados solventes. Por outro lado, materiais híbridos de orgânico/sílica preparados por processo sol-gel, como o 3-glicidoxipropiltrimetoxisilano:tetraetilortosilicato (GPTS:TEOS), permitem produzir filmes com alta estabilidade química e transparência. (2) Assim no presente trabalho foram produzidas blendas híbridas de GPTS:TEOS/PEDOT:PSS afim de combinar a alta condutividade do PEDOT:PSS com a elevada transparência e estabilidade química do GPTS:TEOS. As blendas foram processadas a partir de soluções e depositadas sobre substratos de vidro pela técnica de deposição spray. Foram produzidos filmes com espessuras da ordem de um micrometro, os quais apresentaram transmitância óptica superior a 80 % e resistências de folha da ordem de 110 ohms/sq, valores bem próximos ao ITO comercial.

Palavras-chave: Blendas. Eletrodos transparentes. Aplicação em dispositivos opto-eletrônicos.

Referências:

1 NARDES, A. M. On the conductivity of PEDOT:PSS thin films. 2007. Disponível em: <http://alexandria.tue.nl/extra2/200712256.pdf?origin=publication_detail>. Acesso em: 13 ago. 2014.

2 MOSA, J.; DURÁN, A.; APARICIO, M. Epoxypolystyrene silica sol gel membranes with high proton conductivity by combination of sulfonation and tungstophosphoric acid doping. **Journal of Membrane Science**, v. 361, n. 1-2, p. 135-142, 2010.

IC31

Luz e espelhos: uso de mapas conceituais no estudo de óptica para alunos do ensino médio

RIBEIRO, A. S. L.¹; HERNANDES, A. C.¹; LOURENÇO, A. B.¹

amina_ribeiro@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho temos como objetivos: 1) desenvolver um minicurso que fará parte da dinâmica de formação vinculada ao ensino de óptica, com ênfase nos conceitos de Luz e Espelhos para alunos do Ensino Médio, 2) desenvolver uma metodologia para utilização de mapas conceituais buscando potencializar a aprendizagem e avaliação dos conceitos e promoção da argumentação em aulas de Física e 3) implementar o minicurso para alunos de uma escola pública de São Carlos, avaliando a aprendizagem e eficácia na metodologia utilizada durante o minicurso. No momento, estão em desenvolvimento os 1^o e 2^o objetivos. O minicurso abordará conceitos relacionados à Luz, refração e reflexão, diferentes tipos de espelhos e processo de formação de imagens, os quais serão abordados por meio de aulas expositivas e experimentais. Em relação ao uso dos Mapas Conceituais os mesmos serão utilizados durante o minicurso pela pesquisadora como ferramenta para resumir o conteúdo ensinado e ao final das aulas os alunos farão seus mapas conceituais, os quais cumpriram as funções de instrumento de facilitação da aprendizagem dos alunos e avaliação. (1) A elaboração dos mapas conceituais pelos alunos será filmada em áudio e vídeo em que será analisado se esta ferramenta colabora no processo de argumentação durante atividades colaborativas. O minicurso está em fase final de elaboração e a próxima etapa é validá-lo, por meio de apresentações a pesquisadores do Instituto de Física de São Carlos e depois implementá-lo para alunos de Ensino Médio de escolas públicas da cidade de São Carlos.

Palavras-chave: Mapas conceituais. Óptica. Ensino médio.

Referências:

1 NOVAK, J. D.; CAÑAS, A. J. **La teoría subyacente a los mapas conceptuales y a cómo construirlos**. 2006. Reporte Técnico IHMC CmapTools. Disponível em: <<http://cmap.ihmc.us/publications/ResearchPapers/TeoriaCmaps/TeoriaSubyacenteMapasConceptuales.html>>. Acesso em: 21 ago. 2014.

IC32

Structural correlation between synthetic derivatives of riparins with biological activity against *Schistosoma mansoni*

RUBIO, T. I.¹; MASCARENHAS, Y. P.²; MAFUD, A. C.²

thiagorubio@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Schistosomiasis, an important parasitic disease caused by blood flukes of the genus *Schistosoma*, affects more than 200 million people worldwide. Treatment and control of schistosomiasis is currently dependent upon a single drug, praziquantel (PZQ), but after three decades of use in monotherapy, evidence of emerging drug resistance and low efficacy of praziquantel has been reported and for this reason new antischistosomal agents are urgently required. (1-2) -Riparins are alkaloids isolated from *Aniba riparia* (Nees) Mez (Lauraceae) which present pharmacological activity and low side effects. In this sense, new riparins derivatives were designed, synthesized and evaluated *in vitro* effects against adult worms of *Schistosoma mansoni* (to be published). Herein, we determinate the structures of riparin C and D by X-ray diffraction. In addition, due to their different therapeutic classes, but similar antiparasitic effects, we compared structurally riparins with PZQ, by using shape and charge modelling and overlay optimization. Structural similarity calculations were performed using the MolShaCS (3) package, using different weights for overlapping volumes of van der Waals (VdW) and charge distribution (Q). The overlap was optimized by augmented Lagrangian method for equality constraints (local, non-derivative. Riparin C crystallizes in the orthorhombic system, $Pca2_1$ space group, with four molecules per unit cell. Riparin D crystallizes in the monoclinic system, $P2_1/c$ space group, with four molecules per unit cell, originates dimers with motif set $R_4^4(12)$. When both structures were compared with PZQ, through the molecular electrostatic potential, molecular lipophilicity potential and polar surfaces analysis, the most similar is riparin C, due to the most similar effects as the schistosomicidal activity. From the structural correlation, we can conclude that the riparin C have the most similar effect of PZQ, what may be due to its polar surface area being close to the praziquantel polar area, indicating that they can be excellent leads for further studies.

Keywords: X-Ray diffraction. Structural analysis. Riparins.

Referências:

1 GRYSEELS, B.et al. Human schistosomiasis. **Lancet**, v.368, n.9541, p.106-18, 2006.

2 MORAES, J. Antischistosomal natural compounds: present challenges for new drug screens. In: RODRIGUEZ-MORALES, A. J. (Ed.). **Current topics in tropical medicine**. Rijeka, Croatia: InTech; 2012. p. 333-58.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 de LIMA, L. A. C. V., NASCIMENTO, A. S. MolShaCS: a free and open source tool for ligand similarity identification based on Gaussian descriptors. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v.59, p. 296-303, 2013 doi: 10.1016/j.ejmech.2012.11.013..

IC33

Estudos numéricos sobre o oscilador harmônico clássico e quântico

SANTI, N. S. M.¹; CUCCHIERI, A.¹

natali.santi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O Oscilador Harmônico é um ponto chave da Física. Ele é usado desde a Física Básica para compreensão de sistemas físicos simples até a quantização do vácuo. Em Física Clássica estudamos sistemas massa-mola e lidamos com sua frequência de oscilação, analisamos sua energia mecânica, sua força restauradora e descrevemos sua equação de movimento e velocidade. Em Física Quântica discretizamos as energias possíveis para a partícula, calculamos suas densidades de probabilidade e conseguimos até quantizar o vácuo e o campo eletromagnético por meio de uma série de osciladores harmônicos, conseguindo explicar fenômenos complicados como o bizarro Efeito Casimir.(2) A diferença primordial entre a análise clássica e quântica concentra-se no usual objeto de análise em cada caso. No primeiro, nos concentramos na posição da partícula em função do tempo, já, no segundo, na probabilidade de encontrarmos a partícula em determinada posição do espaço. Aparentemente ambas análises nada têm em comum, porém, podemos tratar ambos os problemas com a mesma variável se pensarmos na densidade de probabilidade, já que o Princípio da Incerteza impossibilita sabermos a posição e a velocidade da partícula, ao mesmo tempo, no caso quântico. Dessa forma, a densidade de probabilidade clássica seria vista como o inverso da velocidade da partícula, sendo maior a probabilidade de encontrar a mesma parada nos extremos da oscilação. Recorrendo então ao Princípio da Correspondência que diz que qualquer fenômeno físico descrito pela mecânica quântica reproduz um fenômeno clássico no limite de elevados números quânticos, é esperado que, para elevadas energias, a probabilidade quântica se compare à probabilidade clássica. (1) Nesse trabalho comparamos as densidades de probabilidade clássica e quântica do oscilador harmônico com o objetivo de visualizar o Princípio da Correspondência para diferentes níveis de energia. Fizemos uma solução analítica do oscilador harmônico quântico unidimensional e comparamos a uma solução numérica do mesmo. (3)

Palavras-chave: Oscilador harmônico quântico. Oscilador harmônico clássico. Estudos numéricos.

Referências:

- 1 COHEN-TANNOUJDI, C. **Quantum mechanics**. New York : John Wiley, 1977.
- 2 GASIOROWICZ, S. **Quantum physics**. New York : John Wiley, 1996.
- 3 KOONING, S. E. . **Computational physics**: fortran version. Redwood City: Addison-Wesley, 1990.

IC34

Explosive synchronization: analysis of the frequency influence in the discontinuous phase transition

SANTOS, E. R.¹; RODRIGUES, F. A.²

edmilson.roque.santos@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Synchronization is a phenomenon which represents the onset of a collective behaviour presented in many systems, such as: neurons, fireflies, chemical processes and social dynamics. (1) Complex networks theory is one of the capable areas to describe and analyze these systems, because represents a variety of standard connections among the interacting elements. In addition, the Kuramoto model is nowadays an acceptable model to describes the synchronization process, besides to be analytically tractable, preserves the non-linearity of the dynamical process. (2) Recently, it has been observed explosive phase transition in synchronization process (3), when the natural frequency of each oscillator has correlation with its degree, raising many questions about the relation between network topology and dynamics. We have investigated based on the Kuramoto model (1,2), that even with a percentage of oscillators which the natural frequencies are positively correlated with their degrees occurs the process of explosive synchronization. Additionally, we have analysed the influence of the most connected vertices, *hubs*, in this context, where we have observed that they do not affect in a significant way the dynamical process. Now, our objective is: we plan to further study certain local measures, in order to visualize what are the characteristics of the synchronous cluster before and after the onset of the synchronization.

Keywords: Kuramoto model. Complex networks. Explosive synchronization.

Referências:

1 ARENAS, A.; DÍAZ-GUILERA, A.; KURTHS, J.; MORENO, Y.; ZHOU, C. Synchronization in complex networks. **Physics Reports**, v. 469, n. 3, p. 93-153, Dec. 2008.

2 STROGATZ, S. H. From Kuramoto to Crawford: exploring the onset of synchronization in populations of coupled oscillators. **Physica D**, v. 143, n. 1-4, p. 1-20, Sept. 2000.

3 GÓMEZ-GARDEÑES, J.; GÓMEZ, S.; ARENAS, A.; MORENO, Y. Explosive synchronization transitions in scale-free networks. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 12, p. 128701-1-128701-4, Mar. 2011.

IC35

Dinâmica de operadores de dois corpos em cadeias de spin exatamente solúveis

SCHOSSLER, M. O.¹; PEREIRA, R. G.¹

matheus.schossler@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Dois problemas de interesse em física da matéria condensada são o modelo de Heisenberg e o modelo XY para uma cadeia de spin-1/2 em uma dimensão. O primeiro modelo possui o Hamiltoniano $H = J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$. Neste trabalho nos concentramos principalmente no modelo XY cujo Hamiltoniano é $H_{xy} = J \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y)$, onde a componente z dos observáveis \vec{S} não é considerada, o que o torna mais simplificado. Para entendermos melhor esses Hamiltonianos, nós os diagonalizamos para sistemas de alguns spins. No caso de 2 spins verificamos que na presença de um campo magnético na direção z , os auto estados antes degenerados deixam de ter as mesmas auto energias e se dividem em três. Considerando que a dimensão do espaço de Hilbert desse sistema cresce exponencialmente com o número de spins (2^N), se torna inviável a diagonalização numérica do Hamiltoniano para cadeias grandes. Para contornar este problema fizemos primeiramente um estudo sobre partículas idênticas e segunda quantização. (1) Vimos que as partículas elementares são ou bósons ou férmions, e também o princípio de exclusão de Pauli que diz que o número de ocupação para férmions é 0 ou 1. Então partimos para a segunda quantização, tratando dos operadores de criação e aniquilação. Neste ponto fomos capazes de observar a equivalência entre os operadores de spin-1/2, S^\pm e S^z , em funções dos operadores de criação e aniquilação de férmions no espaço de Fock. Abordamos a transformação de Jordan-Wigner, que faz o mapeamento entre esses operadores, e assim pudemos escrever o Hamiltoniano conhecido do modelo XY como o de férmions não interagentes sem spin. (2) Com o problema na versão fermiônica nós calculamos as energias possíveis no espaço dos momentos e assim determinamos as auto energias do Hamiltoniano. O objetivo final do projeto é calcular o fator de estrutura dinâmico do operador de troca de dois spins no modelo XY, que está relacionado com a seção de choque de espalhamento de raio X ressonante inelástico. (3)

Palavras-chave: Cadeia de spins unidimensional. Modelo XY. Magnetismo quântico.

Referências:

- 1 ALTLAND, A.; SIMONS, B. **Condensed matter field theory**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. cap 2, p. 39-94.
- 2 AFFLECK, I. **Field, strings and critical phenomena**. New York: North-Holland, 1988.
- 3 KLAUSER, A. et al. Spin-exchange dynamical structure factor of the S=1/2 Heisenberg chain. **Physical Review Letters**, v. 106, p. 157205, 2011.10.1103/PhysRevLett.106.157205.

IC36

Caracterização das interações moleculares entre proteínas da via de síntese de selenocisteínas

SCORTECCI, J. F.¹; SERRAO, V. H. B.¹; SILVA, I. R.¹; da SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹

jessica.scortecci@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A existência de uma maior variedade de aminoácidos codificados pelo código genético tem estimulado estudos sobre os mecanismos de síntese, reconhecimento e incorporação desses resíduos nas cadeias polipeptídicas nascentes. Como exemplo, pode-se destacar a via específica de incorporação do aminoácido selenocisteína, um evento co-traducional dirigido pelo códon UGA. (1) Em bactérias, essa via é formada por uma complexa maquinaria molecular composta pelos elementos Selenocisteína Sintase (Sela), Fator de Elongação Específico de Reconhecimento (SelB), Selenofosfato Sintetase (SelD ou SPS), tRNA específico (SelC ou tRNA^{sec}), sequência específica no mRNA (Sequência de Inserção de Selenocisteínas - SECIS) e Seril-tRNA Sintetase (SerRS), além de outras enzimas que suprem essa via com substratos fundamentais para a biossíntese de selenocisteínas, como a Selenocisteína Liase (CsdB). (2) Pelo fato do selênio ter uma toxicidade elevada no ambiente celular, é fundamental a compreensão do mecanismo catalítico e de elementos essenciais na formação dos complexos da via na etapa de incorporação junto ao tRNA^{sec}. Em bactérias, a interação entre CsdB e SPS foi proposta em 2008, no entanto, nunca verificada experimentalmente. (3) Esse projeto visa à clonagem, expressão e purificação da enzima CsdB envolvida nessa interação específica além da caracterização da sua interação com a enzima SPS. A amplificação e clonagem da enzima CsdB e início dos ensaios de expressão homóloga da molécula de interesse bem como a adaptação do protocolo de expressão e purificação da enzima SPS são mostradas nesse trabalho. Além disso, modelos das interações utilizando as estruturas cristalográficas das moléculas de interesse são utilizados para direcionar a obtenção de mutantes que favorecerão as análises das interações *in vitro* e *in vivo*. Com esses resultados, haverá uma contribuição na caracterização da via de incorporação de selênio além de prover modelos de interação entre proteínas que estejam envolvidas em metabolismos de elementos tóxicos.

Palavras-chave: Selênio . Interação proteína-proteína . Selenocisteína.

Referências:

- 1 WAKL, M.C. et al. Macromolecular complex. **Research Perspectives of the Max Planck Society**, v. 34, n. 1, p. 30-31, 2010.
- 2 TURNER, R. J.; WEINER, J. H.; TAYLOR, D. E. Selenium metabolism in *Escherichia coli*. **Biometals**, v. 11, n. 3, p. 223-227, 1998.
- 3 ITOH, Y. et al. Structure of selenophosphate synthetase essential for selenium incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology**, v. 385, n. 5, p. 1456-1469, 2009.

IC37

Caracterização nos estados sólidos de fármacos antidepressivos: planejamento de novas formas cristalinas de fluoxetina e sertralina

SOLER, T. de O.¹; ELLENA, J. A.²

talitasoler@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde que diferentes formas sólidas apresentam diferentes características físico químicas e como a eficácia da droga é muitas vezes dependente das propriedades físicas, o planejamento de novas formas sólidas pode ser utilizado como uma estratégia de otimização de propriedades farmacêuticas. (1) Neste contexto, o presente trabalho apresenta o desenvolvimento, caracterização e elucidação de novas formas sólidas de Fluoxetina e Sertralina: Nitrato de Fluoxetina (FLXNO₃), Tetrafluoroborato de Fluoxetina (FLXBF₄) e Fluoreto de Sertralina (SRTF). Para estas, foram realizadas determinação estrutural via cristalografia, análise das propriedades térmicas e solubilidades. O FLXNO₃ cristaliza num grupo espacial P2₁/c, apresenta solubilidade de 8.047mg/mL e ponto de fusão menor que sua forma cloreto. O Tetrafluoroborato de Fluoxetina apresenta-se num grupo espacial P2₁2₁2₁. O Fluoreto de Sertralina, cristalina num grupo espacial P2₁2₁2₁ com duas moléculas de SRT que apresentam ambientes supramoleculares diferentes, o que concorda com seu comportamento térmico. A compreensão estrutural destas novas formas sólidas de ISRS mostrou diferentes comportamentos configuracionais e conformacionais de FLX e SRT e constitui uma importante contribuição para desenvolvimento destes fármacos.(2-3)

Palavras-chave: Fármacos. Caracterização. Configuração.

Referências:

1 GIANCATERINO, R. **Depressão infantil:** estratégias de intervenção psicopedagógicas em sala de aula com crianças depressiva. 2005. Disponível em:<<http://meuartigo.brasilecola.com/educacao/depressao-infantil-estrategias-intervencao-psicopedagogica-.htm>>. Acesso em: 13 ago. 2014.

2 HILFIKER, R.; BLATTER, F; RAUMER, M. **Polymorphism:** in the pharmaceutical Industry. Disponível em:<<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/3527607889>>. Acesso em: 13 ago.2014.

3 WOUTER, J.; QUÉRÉ, L. **Pharmaceutical salts and Co-crystals.** Disponível em:<<http://pubs.rsc.org/en/content/chapterpdf/2011/9781849733502-fp001?isbn=978-1-84973-158-4&ser-\\code=bk>>. Acesso em: 13 ago. 2014.

IC38

Biophysical studies of spliceosomal protein U5-200K in *Trypanosoma brucei*

SOUZA, G. E.¹; ROSA e SILVA, I.¹; SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹

guilherme.eduardo.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In trypanosomes, all mRNAs are processed by *trans-splicing*, in which a common spliced leader sequence (SL) is acquired at the 5'-end to yield mature transcripts. (1) Since it is an absent mechanism in vertebrates, in which occurs the *cis-splicing*, participating proteins are considered important parasite-specific targets. SL *trans-splicing* has been characterized mainly in the trypanosomes and nematodes and requires, in addition to the SL RNP, small nuclear ribonucleoproteins (U snRNPs) U2, U4/U6, and U5. Following spliceosome assemblage on the pre-mRNA requires rearrangements to assume its catalytic conformation. (2) The U5-200K protein, which is component of the *Trypanosoma brucei* U5 snRNP, shows helicase DEAD/DEAH box and Sec63 domains conserved. In yeast, Sec63 domain from Brr2 N-terminal cassette is an integral part of its active site, allowing the unwinding of U4/U6 duplex during the catalytic activation of the spliceosome. (3) In order to characterize biophysically *T. brucei* U5-200K, the coding regions for helicase 1, Sec63, helicase 2 and C-terminal domains were amplified from the genomic DNA using specific oligonucleotides and the helicase 1 domain was sub-cloned into pET28a(+) expression vector. Expression tests in *Escherichia coli* Rosetta1 strain revealed overexpression of a recombinant protein with the expected size for helicase 1 domain. Based on the model, generated through homology modeling, it was possible to analyze flexible regions and conserved amino acids when compared with yeast and human homologs. Residues responsible for ATP and snRNA interaction were identified. Solubility tests, purification and crystallization trials of recombinant product will be performed, as well as the cloning of domains helicase 2, Sec63 and C-terminal in expression vector and expression tests of the recombinant products.

Keywords: Trans-splicing. *Trypanosoma brucei*. U5-200K.

Referências:

- 1 BERRIMAN, M. The genome of the African trypanosome *Trypanosoma brucei*. **Science**, v. 309, n. 5733, p. 416-22, 2005.
- 2 SANTOS, K. F. et al. Structural basis for functional cooperation between tandem helicase cassettes in Brr2-mediated remodeling of the spliceosome. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 109, n. 43, p. 17418-23, 2012.
- 3 ANOKHINA, M. RNA structure analysis of human spliceosomes reveals a compact 3D arrangement of snRNAs at the catalytic core. **EMBO Journal**, v. 32, n. 21, p. 2804-18, 2013.

IC39

Development of a high resolution imaging system for a turbulent Bose-Einstein condensate

TONIN, Y. R.¹; HENN, E. A. L.²

yurirt94@gmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Quantum gases studies are made inside atomic traps, where the quantum gas develops its dynamics, occasional phase transitions and/or spacial structures, like vortices or solitons. The phenomena diagnosis is made by images of the atomic cloud outside the trap where the dynamic occurs, that is, in free expansion. The free expansion images avoid technical limitations related to the small size of the imprisoned atomic clouds and their high densities, which raise difficulties to the correct measurement of its properties. Recently, some groups (1-2) demonstrated atomic microscopes, with which it is possible to make high-resolution images of the trapped atoms, opening the possibility of studying atomic clouds in situ. This technique may be of great value for the quantum turbulence experiments of our laboratories, in which there is a great quantity of entangled vortices. The goal of this work is to plan a high resolution imaging system that is adjusted to the necessities of the current experiment, in which we study Quantum turbulence. This adjustment to the experimental apparatus turns out to be the most challenging aspect of the project, since there are many components (coils, lenses, mirrors, vacuum pump, glass cell, etc.) around the region where the imaging system must be installed, resulting in very limited space. Our experiment uses a QUIC type magnetic trap, in which we use 2 quadrupole coils and an Ioffe coil. It happens that the Ioffe coil has great impact on the space availability and optical access around the condensate. Therefore, another Ioffe coil was designed so that a more effective positioning of the new imaging system was possible. Some configurations of the imaging system around the condensate were analysed and we concluded that 3 of them were viable. We studied which optical components (lenses, camera, etc) were the most cost efficient to be used. Parallel to it, a more efficient way of characterizing the light beam was developed with a LabView program. The optical system consists basically of one aspherical lens and two spherical lenses that works as a telescope. The aspherical lens captures the light emitted by the atoms and the telescope enlarges the light beam so it can be captured in a CCD camera. Before implementation, we are in test period of the different configurations. In the end, if the system works as predicted, it is going to have great impact in our experiment, since it will improve the precision of our current analysis and may also open new possibilities to the comprehension of the condensate behaviour.

Keywords: High-Resolution. Bose-Einstein condensate. Image.

Referências:

1 SHERSON, J. F.; WEITENBERG, C.; ENDRES, M.; CHENEAU, M.; BLOCH, I.; KUHR, S. Single-atom



resolved fluorescence imaging of an atomic mott insulator. **Nature**, v. 467, n. 7311, p. 68-72, 2010.

2 BAKR, W. S.; GILLEN, J. I.; PENG, A.; FOLLING, S.; GREINER, M. A quantum gas microscope for detecting single atoms in a hubbard-regime optical lattice. **Nature**, v. 462, p. 74-77, 2009. doi:10.1038/nature08482.

IC40

Análise da distribuição de íons ao redor de proteínas globulares em solução eletrolítica usando técnicas de dinâmica molecular

VISCARDI, L. A. M.¹; CÂMARA, A. S.¹; HORJALES, E.¹

leandro.viscardi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Conhecer as condições ideais em que uma determinada proteína mantém sua estrutura estável tem se tornado imprescindível não só para o desenvolvimento de experimentos *in vitro*, como também para uma melhor compreensão de seu funcionamento em organismo vivo. Um passo para esse entendimento seria reconhecer os mecanismos pelos quais as proteínas agregam ou solubilizam. Muitas doenças podem ser explicadas pela agregação indevida de proteínas. Por outro lado, a nucleação delas é fundamental para experimentos de cristalização. Um parâmetro que condiciona essas formações é a força iônica que atua sobre elas. Esse conceito foi introduzido em 1923, quando Debye e Hückel desenvolveram sua teoria (1), e já no ano seguinte Linderstrøm-Lang associava a força iônica a curvas de titulação. A teoria de Debye-Hückel calcula a formação de uma camada de blindagem ao redor de um corpo esférico, com cargas fixas na superfície, quando envolto por uma solução eletrolítica. Generalizando esse resultado para proteínas, que são corpos globulares com resíduos carregados na superfície, já foi possível verificar sua influência em processos de ionização (2), de enovelamento (3), de difusão, na formação de agregados, na série de Hofmeister, etc. São muitos os processos bioquímicos dependentes da blindagem de Debye, e com o desenvolvimento de rápidos métodos numéricos e computacionais já é possível descrevê-los em mais detalhes. Por fim, é possível simular uma proteína em solução eletrolítica e verificar a formação da camada de blindagem de Debye. Neste trabalho pretendemos simular por métodos de dinâmica molecular uma proteína em equilíbrio com seu solvente e analisar como se comporta a distribuição de íons desse sistema, para então comparar com o resultado teórico. Situações diferentes poderão ser simuladas variando-se a concentração de íons, pois a distribuição dos íons ao redor da proteína dependerão de tais concentrações. Outra variação de interesse neste projeto seria alterar os tipos de íons, verificando a relação do raio de Debye (distância em que os íons ficam ao redor da proteína) com a série de Hofmeister, que relaciona algumas características de soluções proteicas (tensão superficial, solubilidade, estabilidade) com as espécies iônicas presentes. Como proteína modelo será adotada a Cruzeína de *T. cruzi*. Os critérios adotados para sua escolha foram: seu baixo número de resíduos, que facilita a construção de sistemas pequenos a serem simulados, exigindo menos tempo de cálculo; e sua superfície simples, que se assemelha a de uma esfera sem cavidades profundas, sendo coerente com o modelo teórico da formação da camada de blindagem de Debye. As simulações serão realizadas no programa NAMD, em versão com suporte para computação em CUDA, aproveitando a placa gráfica disponível. Serão utilizadas condições periódicas de contorno e o algoritmo de Langevin para dinâmicas em equilíbrio, calculadas classicamente com o campo de força CHARMM37.

Palavras-chave: Distribuição. Íons. Proteínas.

Referências:

- 1 DEBYE, P.; HÜCKEL, E. Zur theorie der elektrolyte. I. Gefrierpunktserniedrigung und verwandte erscheinungen. **Physikalische Zeitschrift**, v. 24, n. 9, p. 185-206, 1923.
- 2 LINDERSTROM-LANG, K. On the ionization of proteins. **CR Trav Lab Carlsberg**, v. 15, n. 7, p. 1-29, 1924.
- 3 STIGTER, D.; DILL, K. A. Charge effects on folded and unfolded proteins. **Biochemistry**, v. 29, n. 5, p. 1262-1271, 1990.

IC41

Avaliação da inativação fotodinâmica sobre o crescimento in vitro de *Staphylococcus aureus*, *E.coli* e *Candida albicans*

WEIS, P. T.¹; KURACHI, C.²; BAGNATO, V. S.²

pri_aya@hotmail.com

¹Centro Universitário Paulista - UNICEP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

A terapia fotodinâmica (PDT) é uma alternativa terapêutica que utiliza luz, oxigênio e fotossensibilizadores para causar morte celular geralmente sem prejudicar o hospedeiro. Esses fotossensibilizadores quando irradiados produzem espécies reativas de oxigênio que atingem biomoléculas da célula-alvo.(1) Esta técnica tem sido utilizada para tratamento do câncer de pele, descontaminação bucal, inativação de agentes patogênicos bem como remoção de contaminantes ambientais. Contudo, ainda existem algumas limitações para o uso da PDT de forma ampla, sendo um dos agentes limitadores a carência de novos fotossensibilizadores mais eficientes e acessíveis.(2) Desta forma, o presente trabalho tem como objetivo a investigação da eficiência PDT utilizando-se alguns fotossensibilizadores modificados, contra os microorganismos *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* e *Candida albicans*.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica . Fotossensibilizadores. Luz.

Referências:

- 1 ABRAMSON, A.L. et al. . Clinical effects of photodynamic therapy on recurrent laryngeal papillomas. . **Archives of Otolaryngology Head Neck Surgery**, v.118, p.25-29, 1992.PMID:1309420.
- 2 BAGNATO,V.S. et al. **Guia pratico de terapia fotodinamica para o tratamento de tumores..** São Carlos: IFSC,2002 .p1-2, 65-91.

IC42

A new detection approach for the chronic kidney disease in initial stages using synthetic biology

ZAMPRONIO, D. K.¹; GUTIERREZ, R. F.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹; NUNES, F.²; MAIZEL, A. S.³; MOREIRA, B. C.³; ONO, B.³; BRAMORSKI, C.³; SANTOS JR, C. D.³; VIEIRA, D.³; LINDENBERG, F. M.³; TANOUYE, F. T.³; KUNDLATSCH, G. E.³; SILVA, I. R.³; MORAES, J. B.³; BRAZACA, L. C.³; RIBOVSKI, L.³; ZANE FILHO, L.³; TREVISAN, M.³; GONÇALVES, M. P.³; FREITAS, M. G.³; HERINGER, O.³; PESSOA, P. H. M.³; MEDEIROS, P.³; WU, R.³; JESUS, T. C. L.³; NOGUEIRA, V. H. R.³; ZANELLI, C. F.³

danilo.zampra@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

³Time Brasil-SP/IGEM 2014

Diagnosis and monitoring of diseases may require quantitative detection of specific biomarkers. Chronic kidney disease (CKD) definition is based on variations of glomerular filtration rate (GFR) which is commonly identified by measuring levels of creatinine on blood. Nevertheless, higher levels of creatinine are detected just in advanced stages, indicating lower GFR, and treatment may already require dialysis even kidney transplant. Here we describe design and assembly of a biodetector for cystatin C (Cys C), a molecule which blood levels rises due to decrease on GFR. (1) Also, Cys C compared with creatinine is less reliant on muscle mass, sex, age and race. Sensor development uses concepts and techniques on synthetic and molecular biology. DNA assemblies are being performed in *Escherichia coli* and tested on *Bacillus subtilis*, a gram-positive bacterium capable of anchoring our Cys C detection module. However, a key step for feasibility of the sensor relies on a nucleotide sequence which sets the threshold for Cys C. Quorum threshold expression element (QteE), which controls quorum-sensing system in the gram-negative bacteria *Pseudomonas aeruginosa* (2), was elected for the task. The new bacteria are therefore a hybrid system with mixed QS systems. Assemblies are being verified with gel electrophoresis and relevant assemblies are being characterized using flow cytometry analysis focused on the green fluorescent protein (GFP) expression. Molecular recognition of Cys C will happen through interaction with Cathepsin S triggering response of QS by a linear auto-inducing peptide (AIP). The proposed strategy can be extended to other biosensors that require setting a threshold. Because of its portable, safe and easy to use characteristics, this device is a very promising platform for clinical screening.

Keywords: Synthetic biology. Chronic kidney disease. Cystatin C.

Referências:

1 GRUBB, A. O. Cystatin c-properties and use as diagnostic marker. In: SPIEGEL, H. E. (Ed.). **Advances in Clinical Chemistry**. New York: Academic Press, 2001. v. 35. p. 63-99.



2 SIEHNEL, R. et al. A unique regulator controls the activation threshold of quorum-regulated genes in *Pseudomonas aeruginosa*. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 107, n. 17, p. 7916-7921, 2010.

IC43

Análise do efeito da fotoestimulação na circulação usando o modelo de membrana corioalantóica

ZANGIROLAMI, A. C.¹; BUZZÁ, H. H.¹; BAGNATO, V. S.¹; KURACHI, C.¹

amanda.zangirolami@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A fototerapia é um processo já utilizado em consultórios odontológicos, dermatológicos, em sessões fisioterápicas, em centros de reabilitação e outros. Nos consultórios de medicina, odontologia e fisioterapia a fototerapia é mais utilizada para reduzir a dor ou acelerar a cicatrização. Já em consultórios dermatológicos ela é mais voltada para tratamentos de eczema, edemas e dermatites. A fototerapia foi escolhida, então, devido ao seu efeito anti-inflamatório (causando a vasodilatação dos vasos), que acelera a regeneração de danos teciduais, o que auxilia no processo de cicatrização. (1) O modelo da membrana corioalantóica (CAM, do inglês chorioallantoic membrane) em ovos de galinha foi escolhido devido a sua facilidade para a observação dos vasos sanguíneos e, portanto, muito utilizado para estudos de angiogênese (formação de novos vasos) e estudos de efeitos vasculares. Além disso, sua instalação laboratorial é simples e não causa qualquer dor ao embrião, se trabalhado até o 14º dia. (2) A angiogênese esta relacionada diretamente à doenças como câncer, psoríase e artrite reumatóide. Já a vasodilatação e a vaso supressão estão relacionadas a doenças cardíacas. Portanto, o entendimento de como esses processos estimulam ou não os vasos sanguíneos, é possível melhorar os tratamentos das diversas doenças relacionadas à eles. O uso de vasodilatadores e vasossuppressores químicos podem ser usados como base de comparação no efeito que a fonte de luz terá sobre os vasos sanguíneos da CAM. A fonte de luz é colocada sobre a membrana e é dada a dose desejada com uma fluência baixa para não haver efeitos térmicos ou qualquer dano à membrana. (3) Serão feitas imagens a cada meia hora da membrana para análise dos vasos sanguíneos, seguida do processamento de imagens, para uma análise quantitativa do efeito vascular dos vasossuppressores e dilatadores químicos e da fotoestimulação. (2) Esse trabalho se baseia na aplicação da fototerapia em modelo da membrana corioalantóica, a fim de entender os efeitos da fotoestimulação na circulação e nos vasos sanguíneos in vivo e poder aplica-los nos tratamentos de diversas doenças com alta taxa de incidência na sociedade.

Palavras-chave: Fotoestimulação. Membrana corioalantóica. Fototerapia.

Referências:

- 1 ROMANIUK, M. S. et al. Influence low intensity laser irradiation on the ultrastructural organization of loach embryo cells. **Citology and Genetics**, v. 48, n. 3, p 171 - 174, 2014.
- 2 STEINER, R. Angiostatic activity of anticancer agents in the chick embryo chorioallantoic membrane assay. **EXS**, v. 61, p. 449-454,1992. PMID: 1377570.
- 3 LIMA, M. V.,. **Vasodilatação induzida pelo calor através de dispositivo portátil no leite na**



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

insuficiência cardíaca descompensada.. 2014. 85p. Tese (Doutorado - Cardiologia) - Faculdade de Medicina, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

PG1

Otimização de estratégias de pré-tratamento de bagaço de cana-de-açúcar na produção de etanol de segunda geração via hidrólise enzimática.

ESPIRITO SANTO, M. C.¹; NOGUEIRA, A. R. S.²; CURVELO, A. A. S.³; GUIMARÃES, F. E. G.¹; AZEVEDO, E. R.¹; POLIKARPOV, I.¹

melissaespiritosanto@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

³Instituto de Química de São Carlos - USP

Atualmente, o aumento da preocupação com a sustentabilidade ambiental, atribuído as perspectivas de esgotamento das reservas de petróleo e os riscos geopolíticos decorrentes da dependência do mesmo, tem direcionado às buscas por fontes renováveis de energia. Neste contexto, as energias alternativas começam a ganhar atenção dentro da matriz energética mundial, tendo como destaque os biocombustíveis, em especial o bioetanol. (1) O emprego de resíduos agroindustriais, principalmente de usinas sucroalcooleiras destaca-se como sendo uma alternativa para a produção de etanol de segunda geração, além de outras fontes de materiais lignocelulósicos, como as gramíneas e os resíduos de indústrias alimentícias e madeiras. (2) No entanto, devido à complexidade das estruturas lignocelulósicas, os processos de hidrólise para disponibilização dos açúcares fermentescíveis presentes nessas biomassas precisam tornar-se mais eficientes e economicamente viáveis. Entre as metodologias aplicadas, a hidrólise enzimática apresenta vantagens referente à especificidade, menor impacto ambiental e ausência de problemas de corrosão. Ainda, para facilitar esta etapa e torná-la mais acessível, submete-se, previamente, o material lignocelulósico a um pré-tratamento, que pode ser físico, químico ou biológico, com o objetivo de contribuir com a susceptibilidade da celulose a ataques enzimáticos. Este processo de pré-tratamento visa à desorganização da estrutura química da matéria lignocelulósica, favorecendo assim as etapas subseqüentes da hidrólise e fermentação. Desta forma, este trabalho tem por objetivo avaliar o pré-tratamento hidrotérmico em diferentes condições e a sua união com o tratamento envolvendo solventes orgânicos (organossolve), assim como a influência destes procedimentos na estrutura e composição da biomassa, bem como na hidrólise enzimática. Com esta finalidade, fez-se uso de técnicas físicas, como difração de raio-x, RMN e microscopia confocal.

Palavras-chave: Bioetanol. Cana-de-açúcar. Pré-tratamento.

Referências:

1 SCHLITTLER, L. A. F. S.; PEREIRA JÚNIOR, N. Produção de etanol a partir de biomassa lignocelulósicos: pré-tratamento e estratégias de processamento. **Diálogos e Ciência**, v. 6, n. 15, 2008. Disponível em:

<http://dialogos.ftc.br/index.php?option=com_docman&task=doc_download&gid=152&Itemid=15>. Acesso em: 25 ago. 2014.

2 BASTOS, V. D. Etanol, álcoolquímica e biorrefinarias. **BNDES Setorial**, n. 25, p. 5-38, 2007. Disponível em: <http://www.bndes.gov.br/SiteBNDES/export/sites/default/bndes_pt/Galerias/Arquivos/conhecimento/bnset/set2501.pdf>. Acesso em: 25 ago. 2014.

PG2

Plant physiology: from molecular to cellular networks

ALMEIDA FILHO, H. A.¹; MARTINEZ, O. B.¹

beto@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Plants are unicellular and multicellular photosynthetic eukaryotes organisms forming a clade that includes the flowering plants, conifers and other gymnosperms, ferns, clubmosses, hornworts, liverworts, mosses and the green algae. (1) The study of plant physiology passes the subatomic level through the molecular to morphological analysis at the microscopic and macroscopic level. We seek to address in this work different strategies to study in detail the physiology of plants. Based on the molecular level approached, the metabolism of 17 plant species whose metabolic reconstruction data were available on the data base Plantcyc (2), were studied using metabolic network model to investigate and quantify the topologic properties of various metabolic networks using the tools of graph theory. (3) Our data show that networks of 17 plants that cover the entire plant kingdom from algae to dicots, has the topology of free scale networks and incredibly the pattern of connections in each of its nodes allows to trace the evolutionary and taxonomic overview of the species studied. Additionally on the other the size scale we observe the pattern of images formed by networks of stomata in the epidermis of leaves from monocot plant *Tradescantia pallida purpurea* exposed to different artificial lighting conditions reaching the conclusion that there are significant changes in images and their histograms, which makes the study of plant physiology by microscopy image analysis a powerful, affordable and capable tool to provide relevant information about photosynthesis and plant physiology.

Keywords: Metabolic networks. Plant physiology. Stomata.

Referências:

1 KEDDY, P. A. **Plants and vegetation:** origins, processes, consequences. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.

2 DREHER, K. A. et al. Introduction to the plant metabolic network: data and tools for analysis, discovery, and teaching. In: INTERNATIONAL PLANT AND ANIMAL GENOME CONFERENCE, 21., 2013, San Diego. **Abstracts....** San Diego: [s.n.], 2013. Abstr. W573. Disponível em: <<https://pag.confex.com/pag/xxi/webprogram/Paper5721.html>>. Acesso em: 22 ago. 2014.

3 JEONG, H. et al. The large-scale organization of metabolic networks. **Nature**, v. 407, n. 6804, p. 651-654, 2000.

PG3

Structural and surface morphology modification in hydrogenated amorphous silicon thin films induced by femtosecond pulses

ALMEIDA, G. F. B.¹; CARDOSO, M. R.¹; AOKI, P. H. B.²; LIMA JUNIOR, J. J. D.³; COSTA, L. da F.¹; RODRIGUES, C. A.³; CONSTANTINO, C. J. L.²; MENDONÇA, C. R.¹

gustavo.forestalmeida@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²UNESP - Presidente Prudente

³Universidade Estadual de Feira de Santana - UEFS

In this work we investigated surface morphology and structural modification on hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) thin films, resulting from femtosecond laser irradiation (150 fs, 775 nm and 1 kHz). Microfabrication processes were carried out scanning sample's surface, at constant speed, with distinct laser fluencies (from 1.8 to 6.2 MJ/m^2). A decrease was observed in the transmission spectra of irradiated samples, whose scanning electron microscopy images revealed surface structures compatible with the Laser Induced Periodic Surface Structure (LIPSS) phenomenon. (1) A statistical analyzes of Atomic Force Microcopy images was performed using a specially developed software, that identifies and characterizes the domains (spikes) produced by the laser irradiation. The height histogram for a sample irradiated with 3.1 MJ/m^2 reveals that the average height of the produced spikes is at 15 nm, which is smaller than the center of height distribution for non-irradiated sample. For fluencies higher than 3.7 MJ/m^2 , however, aggregation of the produced spikes dominates the sample morphology. Raman spectroscopy revealed the formation of a crystalline fraction of 77% for laser fluence irradiation of 6.2 MJ/m^2 , as well as a decrease in size of the produced crystals as a function of fluence. Therefore, our results indicate that there is a compromise of the sample transmission, spikes distribution, crystallization fraction and size of nanocrystals obtained by fs-laser irradiation, which has to be taken into consideration when using this material processing method.

Palavras-chave: Femtosecond laser. Microstructuring. Hydrogenated amorphous silicon.

Referências:

1 SIPE, J. E. et al. Laser-induced periodic surface structure. **Physical Review B**, v. 27, n. 2, p. 1141-1154, 1983.

PG4

Recobrimento biológico de nanossuperfícies utilizando modelagem computacional

AMARANTE, A. M.¹; OLIVEIRA, G. S.²; IERICH, J. C. M.²; FREITAS, L. C. G.³; FRANCA, E. F.⁴; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹; LEITE, F. L.²

amarante_adriano2@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centro de Ciências e Tecnologias para a Sustentabilidade/CCTS - UFSCAR

³Departamento de Química - UFSCAR

⁴Instituto de Química - UFU

O recobrimento de nanossuperfícies por moléculas biológicas vem sendo usado em sensores biológicos de alta precisão, inclusive nanobiossensores com pontas de microscópio de força atômica (AFM, do inglês atomic force microscopy). (1-2) No projeto proposto será realizado um estudo teórico dos procedimentos de funcionalização de pontas do AFM, com o objetivo de determinar a força de interação entre a ponta e o substrato contendo moléculas-alvo. Tais interações são influenciadas pelo recobrimento, em que se emprega uma enzima para detectar um contaminante ambiental ou um anticorpo para detectar uma doença autoimune. A orientação destas moléculas na ponta do AFM ou de qualquer nanossuperfície pode afetar a interação. (1) Com métodos computacionais estatísticos, estimativas das interações específicas entre superfícies podem ser realizadas, simulando experimentos de AFM. Para isso serão utilizadas técnicas computacionais, como segue: (i) Dinâmica Molecular (DM) será usada para estudar propriedades termodinâmicas e cinéticas dos nanossistemas; (ii) potenciais eletrostáticos serão calculados para identificar possíveis centros reativos; cálculos estocásticos determinarão as possíveis configurações dos nanossistemas, (iii) Dinâmica de Monte Carlo (DMC) será usada para determinar as probabilidades de cada configuração e (iv) Dinâmica Molecular Direcionada (SMD, do inglês Steered Molecular Dynamics) para obter energias de interação, a serem comparadas com resultados experimentais de espectroscopia de força atômica (AFS, do inglês atomic force spectroscopy). (1,3)

Palavras-chave: Nanobiossensor. AFM. AFS.

Referências:

1 AMARANTE, A. M.; OLIVEIRA, G. S.; BUENO, C. C.; CUNHA, R. A.; IERICH, J. C. M.; FREITAS, L. C. G.; FRANCA, E. F.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; LEITE, F. L. Modeling the coverage of an AFM tip by enzymes and its application in nanobiosensors. **Journal of Molecular Graphics & Modelling**, 2014. In press. 10.1016/j.jmgm.2014.07.009, Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1093326314001181>>. Acesso em: 01.08.2014.

2 OLIVEIRA, G. S.; LEITE, F. L.; AMARANTE, A. M.; FRANCA, E. F.; CUNHA, R. A.; BRIGGS, J. M.; FREITAS, L. C. G. Molecular modeling of enzyme attachment on AFM probes. **Journal of Molecular Graphics & Modelling**, v. 45, p. 128-136, 2013. doi: 10.1016/j.jm gm.2013.08.007, .

3 BUENO, C. C.; AMARANTE, A. M.; OLIVEIRA, G. S.; DEDA, D. K.; TESCHKE, O.; FRANCA, E. F.; LEITE, F. L. Nanobiosensor for diclofop detection based on chemically modified AFM probes. **IEEE Sensors Journal**, v. 14, p. 1467-1475,2014. doi: 10.1109/JSEN.2014.2301997.

PG5

Numerical model for adjustment of experimental curves characteristics of bulk organicsolar cell heterojunction

AMORIM, D. R. .B.¹; FARIA, R. M.¹

danirba@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Organic photovoltaic devices emerge as a promising technology for direct conversion of solar energy into electricity. (1) They are formed by a complex bi-phase active film, which is compensated by a simple planar structure electrode/hole transport layer/active layer/electrode.(1-2) As hole transport layer the most used polymer is Poly (3,4-ethylenedioxythiophene) poly (styrenesulfonate) (PEDOT:PSS). The most successful active layer is a blend composed by poly(3-hexylthiophene) (P3HT) (as donor) with phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PCBM) (as acceptor). (2) This active layer is in general a random , but uniform , bi -phase blend composed by the photoactive polymer and a highly electronegative material. Despite intensive experimental investigations about charge transport mechanisms involved in organic devices, its complexity requires numerical simulation approaches and theoretical models to elucidate some specific phenomena. (1-2) In the specific case of charge transport in bulk heterojunction photovoltaics, theoretical treatments can shed light on effects related to bimolecular recombination and the charge carriers generation mainly those dependent on the electric field and temperature.

Keywords: Photovoltaic . Heterojunction. Electricity.

Referências:

1 COUTINHO D. J.; FARIA, R. M. Photocurrent in bulk hererojunction solar cells with similar and hole mean free path. **Applied Physics Letters**, v. 103, n. 22, p. 223304, 2013 .

2 BIOM. P. et al. Device model for the operation of polymer/Fullerene bulk heretojunction solar cells. **Physical Review B**, v. 72, n. 8, p. 085205, 2005.doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.72.085205>.

PG6

Avaliação do dano tecidual causado pela terapia fotodinâmica associada à radiação ionizante

ANDRADE, C. T.¹; PIRES, L.¹; PAVONI, J. F.²; BAFFA FILHO, O.²; OLIVEIRA, H. M.³; TIRAPELLI, L. F.³; BAGNATO, V. S.¹; KURACHI, C.¹

cintya_teles@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

³Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

A terapia fotodinâmica (TFD) e a radioterapia são técnicas já conhecidas de combate ao câncer. A TFD combina fotossensibilizador, luz e oxigênio molecular para causar a morte da célula. (1) Já radioterapia é uma técnica que utiliza radiação ionizante para tratamento de tumores. (2) A terapia radiodinâmica (TRD) é uma técnica relativamente nova, com os mesmos princípios básicos da TFD, utilizando radiação ionizante no lugar da luz. O laranja de acridina (AO), quando excitado por raios-x, libera energia e transforma o oxigênio molecular em oxigênio singleto, funcionando como um eficiente radiosensibilizador (RS). (3) Tanto a TRD quanto a associação entre a TFD com a radioterapia foram pouco estudadas até o momento e poderia aumentar o dano causado ao tecido enquanto diminui os efeitos colaterais provenientes da radioterapia. Esse estudo é dividido em duas etapas: estudo in vitro, cujo objetivo é avaliar o dano celular causado pela TRD; e estudo in vivo, que propõe avaliar o dano tecidual da combinação entre a TFD a radioterapia. Na primeira parte, o AO foi analisado em cultura de células de câncer de mama das linhagens MDAMB231 e MCF-7 usando diferentes protocolos de tratamentos: 0, 1, 3, 5 e 7 Gy com e sem AO e sua citotoxicidade foi medida nas concentrações de 1 a 5 ug/mL. Na segunda etapa, a pele sadia de ratos Wistar foi tratada com diferentes protocolos: a) PDT seguido de radioterapia, b) PDT, c) radioterapia e d) radioterapia seguido de PDT; análises clínica, imunohistoquímica e histopatológica, além de espectros de fluorescência, foram realizadas com o intuito de observar a sinergia dos efeitos das terapias combinadas. Os resultados mostraram que o AO não apresenta citotoxicidade significativa em concentrações de 1 e 2 ug/mL. Para a linhagem MDAMB231, observou-se também que, 48 horas após a radioterapia, as células tratadas com 1 ug/mL de AO apresentaram 50% mais morte celular do que as sem AO, esse valor foi para cerca de 80% para células tratadas com 2 ug/mL de AO. A análise da pele do rato mostrou uma maior necrose tecidual para a combinação PDT + 24horas + radioterapia. A combinação radioterapia + 24h + PDT não apresentou um dano significativamente maior devido a ineficiência de produção de PpIX em tecido previamente irradiado, comprovado pelo espectros de fluorescência. Os resultados apresentados auxiliam na escolha da melhor combinação entre os tratamentos. Esse estudo tem o potencial de aumentar o volume de tecido tratado enquanto diminui os efeitos colaterais da radioterapia.

Palavras-chave: Radioterapia. Terapia fotodinâmica. Terapia radiodinâmica.

Referências:

- 1 POTTIER, R. et al. (Ed.). **Phodynamic therapy with ALA**: a clinical handbook. Cambridge: RCS Publishing, 2006.
- 2 BRASIL. Ministério da Saúde. Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva. **Radioterapia**. Disponível em: <http://www.inca.gov.br/conteudo_view.asp?id=100>. Acesso em: 14 ago. 2014.
- 3 KUSUZAKI, K. et al. Acridine orange could be an innovative anticancer agent under photon energy. **In vivo**, v. 21, n. 2, p. 205-214, 2007.

PG7

Desenvolvimento de técnicas de processamento de dados e simulações aplicado ao estudo de meios porosos por ressonância magnética nuclear

ANDREETA, M. B.¹; BONAGAMBA, T. J.¹

mariane.andreeta@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Através de técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é possível extrair informações importantes de meios porosos (1) como cerâmicas, ossos e rochas. Através da manipulação dos spins no líquido contido dentro do meio poroso, consegue-se caracterizar a distribuição de tamanho de poros e a permeabilidade do meio. Isso é possível realizando medidas de parâmetros físicos como os coeficientes de difusão e tempos de relaxação longitudinal (T1) e transversal (T2) do fluido confinado, pois suas propriedades físicas são alteradas pela interação com as paredes do material sólido que o envolve. Desta forma, as técnicas de RMN possibilitam identificar sutilezas nas estruturas destes materiais. Com o desenvolvimento das técnicas experimentais, no entanto, surge a necessidade do acompanhamento das técnicas computacionais que colaboram para a interpretação dos dados e entendimento das dinâmicas experimentais. O objetivo deste projeto é o desenvolvimento de tais ferramentas, com foco principal na construção de uma rede conexões dos poros, construída a partir de imagens obtidas com a micro tomografia do meio. Este modelo de rede complexa do meio permite que seja possível compreender como as estruturas se diferenciam para cada tipo de rocha, osso e cerâmica, e também permite uma compreensão global dos próprios experimentos de RMN. Com este mesmo modelo visa-se o desenvolvimento de ferramentas que permitem correlacionar estas informações extraídas através da técnica de RMN; tanto sobre a dinâmica molecular dos fluidos, assim como parâmetros sobre a estrutura físico-química dos poros e dos próprios fluidos que os permeiam. Além disso, pretende-se neste projeto um estudo de técnicas computacionais/matemáticas utilizadas para análise dos dados, conhecidas como algoritmos da transformada inversa de Laplace (2) para a análise de correlação N-dimensionais dos parâmetros físicos previamente mencionados.

Palavras-chave: Meios porosos. Redes complexas. RMN.

Referências:

1 DUNN, K. J.; BERGMAN, D. J.; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance:** petrophysical and logging applications. Amsterdam: Pergamon, 2002. (Handbook of geophysical exploration: seismic exploration, v. 32).

2 VENKATARAMANAN, L.; SONG, Y.; HURLIMANN, M. D. Solving Fredholm integrals of the first kind with tensor product structure in 2 and 2.5 dimensions. **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 50, n. 5, p. 1017-1026, 2002.

PG8

A matematização da eletricidade por Aepinus no século XVIII

ARAÚJO, G. D.¹; SILVA, C. C.¹

guilherme.david.araujo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho tem como objetivos discutir os fundamentos atuais da historiografia da ciência e aplicar as ferramentas historiográficas ao contexto do trabalho de Franz Ulrich Aepinus, *Um Ensaio Sobre a Teoria da Eletricidade e do Magnetismo*, analisando seus métodos e sua consequência para a ciência da época. O trabalho é dividido em quatro partes; a primeira parte é uma introdução à historiografia da ciência, considerando sua evolução através dos trabalhos de seus contribuintes até o tratamento de sua perspectiva moderna, trazendo os métodos e as posturas atuais para o trabalho com história e filosofia da ciência. (1) A segunda parte trata da situação das teorias da eletricidade e do magnetismo próximas ao trabalho de Aepinus, que vieram a influenciar sua obra. (2) São discutidos os trabalhos que levaram à possibilidade da criação da teoria de Franklin, que norteou a intenção de Aepinus em seu ensaio. A terceira parte apresenta a análise do *Ensaio Sobre a Teoria da Eletricidade e do Magnetismo*, a obra de Aepinus que é tema deste trabalho. (3) São expostos os experimentos do autor e sua intenção de estabelecer a simetria de leis entre os fenômenos da eletricidade e do magnetismo, através do uso e da correção da teoria de Franklin, com foco em um tratamento matemático peculiar a ele na época, divergente dos métodos não-matemáticos dos pensadores da natureza que até então tratavam deste assunto. A quarta parte é uma conclusão que abrange as consequências deste trabalho de Aepinus e os passos seguintes da teoria, cada vez mais dependente do uso da matemática para sua formulação.

Palavras-chave: Historiografia. Aepinus. Eletricidade.

Referências:

- 1 KRAGH, H. S. **An introduction to the historiography of science**. Cambridge: Cambridge University Press, 1987. 235 p.
- 2 HEILBRON, J. L. **Electricity in the 17th and 18th centuries**: a study of early modern physics. Mineola: Dover, 1999. 606 p.
- 3 HOME, R. W. **Aepinus's essay on the theory of electricity and magnetism**: introductory monograph and notes. Princeton: Princeton University Press, 1979. 514 p.

PG9

Estudos estruturais por espalhamento a baixo ângulo (SAXS) e cristalografia de raios-X de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios

ARAUJO, E. A.¹; POLIKARPOV, I.¹

evandroares@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A depolimerização enzimática de materiais polissacarídicos é um passo fundamental para a produção de biocombustíveis e produtos químicos a partir da biomassa lignocelulósica. Para isso, vários estudos foram realizados, na busca de entender os mecanismos enzimáticos responsáveis pela sacarificação. Entretanto, muitas questões ainda precisam ser respondidas, sobre sistemas mais eficientes para a produção de celulases, especialmente a avaliação do desempenho dos mecanismos de ação enzimática, suas propriedades de hidrólise e suas aplicações na indústria de biorrefinarias. Classicamente, dois diferentes mecanismos de deconstrução enzimática da biomassa por microrganismos são conhecidos: (i) deconstrução da biomassa por fungos e algumas bactérias, utilizando um arsenal de enzimas secretadas, com ação independente/complementar entre si e (ii) complexos enzimáticos, chamados celulosomas, utilizados principalmente pelas bactérias anaeróbias. (1) Uma estratégia intermediária (iii) é usada por algumas bactérias, ao secretarem enzimas com mais de um domínio catalítico na mesma cadeia polipeptídica (2), no qual nossos estudos serão focados. A análise comparativa entre proteínas mono e multi domínios é considerada uma importante estratégia biotecnológica, que lança as bases para a construção de enzimas artificiais (quimeras) com diferentes funções enzimáticas e com maior potencial catalítico. Desta forma, propomos estudar hidrolases de glicosídeos (GHs) com múltiplos domínios catalíticos, por técnicas de difração/espalhamento de raios-X a baixo ângulo (3), aliadas a outras técnicas, procurando relacionar e correlacionar a estrutura proteica com os mecanismos enzimáticos. Para alcançar estes objetivos, a estrutura cristalográfica de enzimas com mais de um domínio catalítico, sejam elas com um domínio catalítico flanqueado por um ou mais CBMs, serão elucidadas. Nossos estudos permitirão análises comparativas, que poderão ajudar a definir as bases moleculares envolvidas na mecânica e termodinâmica da interação entre os domínios e reconhecimento de distintos substratos na depolimerização de biomassa. Assim, esse enfoque, inédito até então, prestar-se-á à exploração do comportamento e das propriedades destas duas classes de enzimas. Como resultados preliminares, tem-se a clonagem, expressão e purificação de 5 hidrolases de glicosídeos: duas GH 5, uma GH 6, uma GH 9 e uma GH 12, todas de origem bacteriana. Destas enzimas, somente dois alvos apresentam um módulo de ligação a carboidratos (uma GH5 e uma GH9), enquanto as outras enzimas apresentam somente o domínio catalítico. Atualmente estamos realizando experimentos de cristalização destas enzimas, exceto para a enzima GH9, a qual foi cristalizada, como também alguns conjuntos de dados de difração foram coletados.

Palavras-chave: Raios-X. Enzimas. Bioenergia.

Referências:

- 1 MEDIE, F. M. et al. Genome analyses highlight the different biological roles of cellulases. **Nature Reviews Microbiology**, v. 10, n. 3, p. 227-234, 2012.
- 2 BRUNECKY, R. et al. Revealing nature's cellulase diversity: the digestion mechanism of caldicellulosiruptor bescii CelA. **Science**, v. 342, n. 6165, p. 1513-1516, 2013.
- 3 SKOU, S.; GILLILAN, R. E.; ANDO, N. Synchrotron-based small-angle X-ray scattering of proteins in solution. **Nature Protocols**, v. 9, n. 7, p. 1727-1739, 2014.

PG10

Propriedades estruturais e ópticas em polímeros emissores de luz induzidas por interfaces sondadas por filmes ultrafinos e espectroscopia de molécula isolada

ARAUJO, F. L.¹; GUIMARAES, F. E. G.¹

franlaraujo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O entendimento sobre a natureza dos processos ópticos e a relação com o arranjo e a estrutura molecular pode levar a síntese de novos materiais e métodos de preparação que permitem o desenvolvimento de dispositivos optoeletrônicos de multicamadas com elevado ganho de eficiência eletroluminescente. Um dos grandes desafios atuais na melhoria da eficiência destes dispositivos é alcançar o controle da conformação da cadeia polimérica (grau de ordem e desordem), como também, o entendimento de como a conformação molecular e os processos ópticos são modificados por interfaces e superfícies (1) em dispositivos de multicamadas. Neste contexto, a espectroscopia de molécula isolada (SMS) é uma técnica poderosa que remove a desordem não homogênea e permite a coleta de propriedades que até então eram acessadas por meio de uma média de valores avaliados de um conjunto muito grande de moléculas. (2) Em trabalhos anteriores em nosso grupo de pesquisa realizamos um estudo sobre as propriedades ópticas e estruturais do polifluoreno poli (9,9-dioctylfluoreno) (PFO) em filmes ultrafinos e em um sistema de moléculas isoladas depositadas sobre substrato de quartzo. Investigamos as alterações das propriedades estruturais ocasionadas pelas interações na interface entre o filme polimérico e o substrato, e constatamos que a emissão de filmes ultrafinos de PFO são ideais para entender os efeitos dessa interação PFO/substrato uma vez que as propriedades de volume são minimizadas. (3) No projeto a ser desenvolvido no doutorado a partir dos resultados obtidos até o momento, iremos dar continuidade ao estudo da interação filme/substrato que induz um ordenamento dos meros dos seguimentos conjugados do polímero que leva a formação das camadas de fase planar. O objetivo geral do projeto visa a caracterização óptica e estrutural de filmes ultrafinos, como também, a detecção de moléculas isoladas de polímeros conjugados emissores de luz. Os objetivos específicos do projeto são: i) Estudar a interação entre as moléculas tendo em vista que temos o controle na deposição do PFO. ii) Alterar a interação com o substrato mudando o caráter superficial hidrofóbico e hidrofílico e a temperatura. iii) Utilizar polieletrólitos como camadas intermediárias e camadas SAM (Self Assembled Monolayer) sobre superfície metálica. Utilizar para deposição das amostras poliméricas substratos como quartzo, vidro, mica e silício. iv) Modificar a carga superficial do substrato utilizando tratamento com plasma. v) Realizar medidas de AFM nas amostras de PFO. vi) Realizar medidas de moléculas isoladas com a temperatura: criogênicas e próximas da T_g. vii) Realizar medidas de polarização e da emissão com o tempo. Para o estudo de interesse iremos empregar os métodos de espectroscopia de absorção UV/Vis, medidas de ângulo de contato, microscopia confocal de varredura a laser (LSCM), microscopia de força atômica (AFM) e técnicas de medidas elétricas.

Palavras-chave: Polifluoreno. Molécula isolada. Fase planar.

Referências:

- 1 VOGELSANG, J.; LUPTON, J. M. Solvent vapor annealing of single conjugated polymer chains: building organic optoelectronic materials from the bottom up. **Journal of Physical Chemistry Letters**, v. 3, n. 11, p.1503 - 1513, 2012.
- 2 BARBARA, P. F. et al . Single-molecule spectroscopy of conjugated polymers. **Accounts of Chemical Research**, v. 38, n. 7, p. 602 - 610, 2005.
- 3 ARAÚJO, F. L. . **Estudo das propriedades ópticas e estruturais de polifluorenos por meio de espectroscopia de filmes ultrafinos e de moléculas isoladas** . 2014. 109 p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

PG11

Geração de estados de Fock via localização de Anderson

ARAUJO, H. S.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

hugosanchezdearaujo@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A investigação de estados não clássicos do campo eletromagnético - como por exemplo estados de Fock - é alvo de pesquisa atual (1), tanto teórica como experimental, devido ao presente alcance da precisão experimental, que acarreta na influência de flutuações estatísticas da distribuição dos fótons com relação a alguns tipos de experimentos, como, por exemplo, a geração de estados comprimidos para detecção de ondas gravitacionais. Em 1990, J. R. Kuklinski propôs um método de geração de estados de Fock do campo eletromagnético em uma cavidade de alto fator de qualidade via localização de Anderson. (2) O sistema consiste no processo de amplificação estocástica de um modo não estacionário da cavidade. Este modo é concomitantemente sujeito a um processo não linear que catalisa o processo de localização de Anderson. Mostra-se que o campo eletromagnético construído tem características fortemente não clássicas. Através da localização de Anderson é possível obter uma distribuição de probabilidade do número de fótons muito estreita com o propósito de gerar um estado de Fock quase perfeito em um dado modo do campo eletromagnético. É essencial para a Localização de Anderson que exista a não linearidade. Para isso, propomos a substituição de um meio não linear pela interação radiação-matéria através da passagem de átomos pela cavidade.

Palavras-chave: Estados de Fock. Localização de Anderson. Estatística de fótons.

Referências:

1 KRAUSE, J.; SCULLY, M. O.; WALTHER, H. State reduction and n -state preparation in a high-Q micromaser. **Physical Review A**, v. 36, n. 9, p. 4547-4550, 1987.

2 KUKLINSKI, J. R. Generation of Fock states of the electromagnetic field in a high-Q cavity through the Anderson localization. **Physical Review Letters**, v. 64, n. 21, p. 2507-2510, 1990.

PG12

Prospecção de linhagens bacterianas produtoras de biossurfactante a partir de rocha de um reservatório offshore de petróleo

ARGENTIN, M. N.¹; CORRÊA, T.¹; BOSSOLAN, N. R. S.¹

marcela.argentin@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nas últimas décadas, os biossurfactantes têm atraído considerável atenção científica devido à sua alta biodegradabilidade, baixa toxicidade, atividade em extremos de temperatura, pH e salinidade. Banat e colaboradores (1), em uma revisão feita sobre as potenciais aplicações comerciais dos biossurfactantes, indicam que a indústria do petróleo representa um mercado importante para estes compostos, que podem ser utilizados em processos de recuperação avançada de petróleo que utilizam microrganismos (MEOR) e de biorremediação de hidrocarbonetos. No primeiro caso, os microrganismos nos reservatórios são estimulados a produzir surfactantes, que ajudam na diminuição da tensão interfacial entre óleo e rocha, reduzindo as forças capilares que impedem o óleo de se mover através dos poros da rocha. Biossurfactantes também podem atuar na emulsificação do petróleo, auxiliando na separação dos filmes de óleo aderidos às rochas. No presente trabalho, uma busca por bactérias produtoras de biossurfactantes foi feita a partir de cultivos inoculados com amostras de rochas coletadas em profundidade de cerca de 3.000 metros de um reservatório *offshore* localizado na região sudeste do Brasil. O meio LB foi utilizado para o cultivo de bactérias aeróbias enquanto o meio BANHT, para o cultivo das anaeróbias. Os cultivos foram incubados à temperatura de 55°C e testados nas salinidades de 35, 70 e 120 g/L de NaCl. O isolamento das linhagens foi feito em meio sólido, nas mesmas condições. O método de emulsificação (E24) foi utilizado para a verificação da produção de substâncias tensoativas nos cultivos dos isolados bacterianos. Foram obtidos 38 isolados em aerobiose, dos quais 16 apresentaram-se positivos para a presença de biossurfactante, com índices de E24 que variaram de 11 a 68%. O sequenciamento do DNAr 16S (2) foi feito para 7 isolados, dos quais 6 apresentaram similaridade de 99% com *Bacillus alveayuensis* (Ar70C7-2) e 1 apresentou 97% de similaridade com *Pseudomonas fluorescens* (Ar70C8). O isolado Ar70C7-2 foi testado para a produção de biossurfactante nas salinidades de 35, 70 e 140 g/L com e sem agitação. Nos cultivos mantidos em agitação, os maiores valores médios de E24 foram 48,7% ($\pm 12,6$) - 6º dia, 47,2 % ($\pm 9,0$) - 3º dia e 53,7 % ($\pm 3,9$) - 3º dia, para 35, 70 e 140 g/L, respectivamente. Já para os cultivos feitos sem agitação, os maiores valores médios de E24 foram 69,7 % ($\pm 1,3$), 70,1 % ($\pm 2,9$) e 42,9 % ($\pm 6,9$) todos no 8º dia, para 35, 70 e 140 g/L. A purificação e a caracterização do biossurfactante produzido por este isolado será realizada em uma próxima etapa do trabalho.

Palavras-chave: Biossurfactante. Petróleo. *Bacillus*.

Referências:

1 BANAT, I. M.; MAKKAR, R. S.; CAMEOTRA, S. S. Potential commercial applications of microbial surfactants. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 53, n. 5, p. 495-508, 2000.

2 WATANABE, K.; HAMAMURA, N.; KAKU, N. Molecular identification of microbial populations in petroleum-contaminated groundwater. In: SPENCER, J. F. T.; RAGOUT DE SPENCER, A. L. (Ed.). **Environmental microbiology: methods and protocols**. Totowa: Humana Press, 2004. cap. 22, p. 235-242. (Methods in Biotechnology, v. 16).

PG13

Informação quântica via ressonância quadrupolar nuclear

ASCONA, C. R.¹; BONAGAMBA, T. J.¹; CARVALHO NETO, J. T.²

crivera@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - Campus Araras

A ressonância quadrupolar nuclear (RQN) é uma técnica de espectroscopia que tem muitas similaridades com a ressonância magnética nuclear (RMN). Por exemplo, um fato comum entre a RQN e a RMN é o uso de pulsos de radiofrequência (rf) para excitar transições entre os níveis de energia nucleares. A principal diferença entre ambas as técnicas é que em RQN os experimentos podem ser realizados sem a aplicação de campos magnéticos externos ou aplicando pequenos campos magnéticos perturbativos. (1) Esta característica da RQN torna-a atraente por ser de baixíssimo custo, quando comparada à RMN. A RMN mostrou ser uma ferramenta com resultados positivos nos estudos de Informação Quântica (IQ). Esse fato, e as similaridades que existem entre ambas as técnicas, motivaram estudos de IQ usando RQN. No entanto, existem poucas propostas sobre o uso de RQN em IQ. Estudos teóricos mostraram a implementação de um sistema de 2 qubits em um sistema de RQN puro (2), onde o sistema apresenta dois pares de níveis degenerados. Essa degenerescência pode ser levantada através da excitação do sistema com dois campos de rf com diferentes fases e amplitudes, gerados por duas bobinas cruzadas. Outra proposta foi o uso de pulsos circularmente polarizados utilizados para distinguir os níveis degenerados.(3) Particularmente, essa quebra de degenerescência permitiu introduzir conceitos da física atômica e teoria de campos ao contexto de spins nucleares, respeitando propriedades e leis da mecânica quântica. Nossa proposta é utilizar técnicas empregadas por RMN em IQ e adaptá-las ao caso da RQN. Para diferenciar os estados degenerados, empregamos campos magnéticos estáticos perturbativos fracos, no momento produzidos pelos magnetos supercondutores do nosso laboratório, na forma de campos dispersos. O núcleo utilizado foi ^{35}Cl do cristal de KClO_3 , que possui spin nuclear 3/2.

Palavras-chave: Ressonância quadrupolar nuclear. Informação quântica. Tomografia estado quântico.

Referências:

1 DAS, T.P.; HAHN, E. L. **Nuclear quadrupole resonance spectroscopy**. New York: Academic Press Inc, 1958.

2 FURMAN, G.B.; GAREN., S.D.; MEEROVICH, V.M.; SOKOLOVSKY, V.L. Two qubits in pure nuclear quadrupole resonance. **Journal Physics: condensate matter**, v. 14, n.37, p.8715-8723, 2002.

3 POSSA, D.; GAUDIO, A.C.; FREITAS, J.C.C. Numerical simulation of NQR/NMR: applications in quantum computing. **Journal Magnetic Resonance**, v. 209, n.2, p. 250-260, 2011.

PG14

Simulação de alto desempenho aplicada a métodos numéricos de alta ordem em dinâmica de flúidos computacional

AURICHIO, V. H.¹; CUCCHIERI, A.¹; OLIVEIRA, M. L. B.²

vinicius.aurichio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemáticas e da Computação - USP

O estudo da dinâmica dos flúidos é uma das mais antigas e complexas das muitas áreas da física. Pode-se dizer que a área nasceu quando Leonhard Euler e Daniel Bernoulli aplicaram as Leis de Newton - válidas para sistemas discretos - a sistemas contínuos. As equações obtidas unidas à conservação da massa e da energia formam as equações de Navier-Stokes. A natureza não linear dessas equações faz com que seja muito difícil obter soluções exatas além de tornar raras as situações em que aproximações perturbativas são possíveis. Por isso o estudo da dinâmica dos flúidos é uma ativa área de pesquisa ainda hoje, mesmo suas equações sendo conhecidas desde o século XIX. Considerando essa situação, métodos computacionais se tornam imprescindíveis para avançar no entendimento da dinâmica de flúidos e para possibilitar o desenvolvimento de tecnologias que envolvam gases e líquidos. Com o aumento do tamanho dos sistemas de interesse e de sua complexidade, tornam-se necessários métodos numéricos de ordem alta - para reduzir o número de pontos discretizados - e o uso de computação escalável - para aproveitar o poder computacional de múltiplas máquinas. O presente trabalho tem por objetivos desenvolver métodos numéricos de alta ordem no contexto de dinâmica de flúidos computacional (1) e implementá-los num formato compatível com clusters de computadores. Construiremos um código próprio e o utilizaremos para estudar sistemas em que multiplas escalas espaciais estão envolvidas, tais como sistemas turbulentos. Além disso, o foco do projeto está em flúidos compressíveis a altas velocidades. (2)

Palavras-chave: Dinâmica de flúidos computacional. Métodos numéricos de alta ordem. Computação de alto desempenho.

Referências:

1 LU, P.; OLIVEIRA, M.; LIU, C. High-order compact scheme for boundary points. **International Journal of Computer Mathematics**, v. 87, p.1795-1819, 2010. doi:10.1080/00207160802506512.

2 LIU, C. ; LU, P.; OLIVEIRA, M.; XIE, P. Modified upwinding compact scheme for shock and shock boundary layer interaction. **Communications in Computational Physics**, v. 11, p. 709, 2012. Disponível em: <<http://enu.kz/repository/2010/AIAA-2010-723.pdf>>. Acesso em: 22 ago. 2014.

PG15

Caracterização molecular e estrutural do vírus de *Leishmania* LRV1-4

AZEVEDO, E. C.¹; CASSAGO, A.²; PORTUGAL, R. V.²; THIEMANN, O. H.¹

erikaa.chang@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²LNNano - CNPEM

O estudo dos protozoários é relevante por diversos motivos, dentre os quais podemos listar a sua diversidade, sua importância evolutiva para o surgimento de eucariotos e metazoários e além do seu impacto na saúde pública, com diversas espécies parasitas de mamíferos. O *Leishmania* RNA vírus 1-4 (LRV1-4) é um vírus da família *Totiviridae*, de capsídeo icosaédrico que codifica duas proteínas (proteína capsidial e RNA polimerase). (1) Dados recentes indicam o envolvimento do LRV1-4 na patogênese de *Leishmania* no hospedeiro humano, (2) tornando seu estudo de fundamental importância para o entendimento dessa doença e de seu papel na relação parasito-hospedeiro. Este trabalho objetiva realizar estudos aprofundados sobre o vírus, utilizando técnicas como Microscopia Eletrônica de Transmissão por Negative Stain e Crio-Microscopia Eletrônica. Os estudos aqui propostos irão permitir a construção de um modelo estrutural do capsídeo do LRV1-4 e, assim, sua identificação correta dentre os *Totiviridae*. Além das contribuições ao conhecimento da biologia/patogenia do LRV1-4 este estudo representa a primeira caracterização estrutural de um capsídeo viral realizada no Brasil e assim um avanço importante para a área de virologia e biologia estrutural no país. Estão sendo realizadas tentativas de transfecção do gene codificante para o capsídeo viral no sistema pLEXY (Jena Biosciences). Além disso, foram realizados gradientes de sacarose para a purificação do vírus a partir do extrato celular de *L. guyanensis*. As frações que apresentaram RNA viral foram levadas ao LNNano- CNPEM para observação por Microscopia Eletrônica de Transmissão. Novas técnicas de purificação estão sendo utilizadas para obter melhora na preparação da amostra.

Palavras-chave: *Leishmania*. LRV1-4. Microscopia eletrônica de transmissão.

Referências:

1 RO, Y. T.; KIM, E. J.; LEE, H. I.; SAIZ, M.; CARRION JR, R.; PATTERSON, J.L . Evidence that the fully assembled capsid of *Leishmania* RNA virus 1-4 possesses catalytically active endoribonuclease activity. **Experimental and Molecular Medicine**, v. 36, n. 2, p. 145-156, 2004.

2 IVES, A. et al. *Leishmania* RNA virus controls the severity of mucocutaneous Leishmaniasis . **Science**, v. 331, n. 6018, p. 775-778, 2011. doi: 10.1126/science.1199326.

PG16

Avaliando a estrutura de redes complexas com caminhadas aleatórias

BAGNATO, G. G.¹; TRAVIESO, G.¹

gui.bagnato@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Caminhadas aleatórias têm-se mostrado muito úteis para o estudo estrutural de redes complexas pois dependem apenas de informações locais (vértices vizinhos), fazendo com que sejam adequadas para análises de redes muito grandes. Entre elas, destaca-se o *self-avoid walking* (SAW) que possui a restrição de não visitar um vértice que já foi alcançado, ou seja, apresenta memória do caminho percorrido. Por este motivo o SAW tem-se mostrado mais eficiente do que caminhantes sem restrição na exploração da rede. (1,2) Entretanto, por não se tratar de um processo markoviano ele apresenta grande complexidade analítica tornando indispensável o uso de simulações computacionais para melhor compreensão de sua dinâmica. Neste trabalho, estudamos o comportamento deste tipo específico de caminhante em redes aleatórias do tipo Erdos-Renyi e Barabasi-Albert, assim como em redes reais diversificadas (tamanhos variados, diferentes distribuições de grau e de tipos) a fim de identificar características estruturais desses sistemas. Com o intuito de validar nosso algoritmo, comparamos nossos resultados preliminares com equações analíticas conhecidas para redes k -regulares. (3) Feito isto, identificamos duas características importantes do SAW ao analisarmos as redes reais, a fração de caminhantes que visitou o vértice j partindo de um vértice i e seu comprimento médio ao passar pelo vértice j . Ao combinarmos estas duas grandezas e efetuarmos a soma sobre todos os vértices origens, definimos uma medida de centralidade, baseada apenas nesse passeio aleatório, que nos mostra quais são os vértices mais acessados da rede independente da posição inicial do caminhante. Além disso, utilizando a fração de caminhantes conseguimos identificar com sucesso a presença de comunidades em alguns casos para certas redes reais. Assim, nosso estudo mostrou ser capaz de determinar características importantes das redes analisadas, como os vértices mais acessados via SAW e a presença de comunidades (em alguns casos), que apesar de ser uma importante propriedade estrutural da rede, ainda é um problema em aberto. Os próximos passos deste trabalho são melhorar o método de separação de comunidades, que apesar de funcionar bem para algumas redes para outras o resultado final diverge do esperado, comparar nossa medida de centralidade com outras já conhecidas e analisar a distribuição dos valores dessa centralidade para diversas redes, tanto reais como teóricas.

Palavras-chave: Caminhada aleatória. Redes complexas. Características estruturais.

Referências:

1 YANG, S. J. Exploring complex networks by walking on them. **Physical Review E**, v.71, n. 1, part 2, p. 016107-1-016107-5, 2005.

2 MILLÁN, V. M. L.; CHOLVI, V.; LÓPEZ, L.; ANTA, A. F. A model of self-avoiding random walks for



searching complex networks. **Networks**, v. 60, n. 2, p. 71-85, 2012.

3 HERRERO, C. P. Kinetic growth walks on complex networks. **Journal of Physics A**, v. 38, n. 20, p. 4349-4364, 2005.

PG17

Investigation of quantum turbulence in trapped cold atoms of ^{87}Rb

BAHRAMI, A.¹; TAVARES, P.¹; FRITSCH, A.¹; TONIN, Y.²; TELLES, G.¹; HENN, E. A. L.¹; BAGNATO, V. S.¹

usabasalt@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

The idea that turbulence can be possible in a Quantum fluid such as superfluid via the tanglement of quantized vortex lines which have been cooled down to temperatures close to absolute zero, was first suggested by Richard Feynman. (1) Our group at IFSC observed quantum turbulence phenomenon in the trapped cold atoms of Rb 87 in 2009 (2), since then our theoretical and experimental teams jointly are doing research to better understand some of interesting features which has not been studied in details before. Computer simulations play a particularly important role in the development of a theoretical understanding of quantum turbulence. In the experiment we are using time-of-flight (TOF) expansion to obtain the space distribution of the normal Bose-Einstein condensates (BECs) and also clouds which are magnetically perturbed. Considering that the size or appeared vortices are comparable to the size of cloud, we are using Fourier transform to obtain the projected momentum distribution $n(k)$. Following our recent paper (3), efforts are being done to analyze the momentum distribution to investigate the inertial range of momentum associated with the appearance of the power law dependence. In the new experiment implemented in 2013 our group has been able to study time evolution of the momentum distribution and consequently investigate the energy cascade which was left aside without having any deep studies due to lack of data in 2009. Fortunately our experimental results have been supported with strong semi-theoretical simulations as well.

Keywords: Quantum turbulence. Bose-Einstein condensation. Energy cascade.

Referências:

1 FEYNMAN, R. P. Application of quantum mechanics to liquid helium. In: GORTER, C. J. (Ed.). **Progress in low temperature physics**. Amsterdam: North Holland Publishing Company, 1955. v. 1, cap. 2, p. 17-53.

2 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301-1-045301-4, 2009.

3 THOMPSON, K.; BAGNATO, G. G.; TELLES, G. D.; CARACANHAS, M. A.; SANTOS, F. E. A.; BAGNATO, V. S. Evidence of power law behavior in the momentum distribution of a turbulent trapped



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

Bose Einstein condensate. **Laser Physics Letters**, v. 11, n. 1, p. 015501-1-015501-5, 2014.

PG18

Nanofibras polimericas biodegradaveis funcionalizadas para aplicações em nanomedicina e nanotoxicologia

BALLESTEROS, C. A. S.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

carturosuarez@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As nanofibras poliméricas tem desempenhado um papel fundamental no campo de regeneração de tecidos, sendo utilizadas na maioria dos tecidos do corpo humano. (1) As nanofibras são fabricadas principalmente pela técnica de eletrospinning (electrospinning)(2), por sua simplicidade técnica e possibilidade de obtenção de fibras com ótimas propriedades morfológicas. Dependendo do tipo de polímero empregado podem ser biodegradáveis e biocompatíveis. Os materiais poliméricos, biodegradáveis e biocompatíveis possuem propriedades físico-químicas, estabilidade e não produz efeitos tóxicos em tecidos e células. Apesar destas interessantes propriedades, sua utilidade em nanomedicina é limitada por falta de bioatividade, problema que focaremos durante este projeto modificando sua superfície e funcionalizando-as com biocompósitos e nanomateriais. Desta maneira, o objetivo principal deste projeto de doutorado é a funcionalização e caracterização de nanofibras de polímeros biodegradáveis com peptídeos anfifílicos (3), fatores de crescimento e nanopartículas, visando à obtenção de sistemas com elevada estabilidade e propriedades bem definidas para aplicações em regeneração de tecidos e biossensores. Ênfase será dada ao entendimento das propriedades físico-químicas, térmicas e biodegradáveis utilizando técnicas espectroscópicas, microscópicas e calorimétricas. Além disso, estes nanocomplexos serão testados in vitro para avaliação da toxicidade e capacidade de interagir com cultivos celulares.

Palavras-chave: Nanofibras. Nanopartículas. Nanomedicina.

Referências:

- 1 NAIR, L. S; LAURENCIN, C. T. Biodegradable polymers as biomaterials. **Progress in Polymer Science**, v. 32, n. 8-9, p. 762-798. 2007.
- 2 SHIB, Y. et al. Electrospinning: a whipping fluid jet generates submicron polymer fibers. **Applied Physics Letters**, v. 78, n.8, p. 11-49, 2001. .
- 3 PARAMONOV, S. E. et al. Self-assembly of peptide-amphiphile nanofibers: the roles of hydrogen bonding and amphiphilic packing. **Journal of the American Chemical Society**, v. 128, n. 22, p. 7291-7298, 2006.

PG19

Study of third-harmonic generation at interfaces affected by other linear and nonlinear processes

BARBANO, E. C.¹; HARRINGTON, K.²; ZILIO, S. C.¹; MISOGUTI, L.¹

emerson.barbano@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²University of Bath

The third-harmonic generation (THG) is a third-order process which is the first optical nonlinearity of an isotropic media. It is an important process for basic material characterization and for more applied purpose such as in the THG microscopy. Although such process has been studied for long time, it still provides interesting surprises. In a recent work we observed that the THG in optical materials using femtosecond pulses presents spectral interference due to the broadband spectrum and, in this way, we could distinguish the bulk and interface contribution on the light generation. (1) Also, we observed that the amount of the third harmonic (TH) generated at the material output interface is stronger than one generated at the input interface. Such asymmetry was never well understood, but we could explain by taking into account the self-focusing effect at the output interface that reduces the beam waist radius and, consequently, increases the irradiance and THG. (2) Here, we present such measurements on commercial optical glasses, BK7, SK11 and F2, interfaces, using silica as a reference, and we also show new results obtained at interfaces of a cuvette filled with different solvents. Such cuvette allows measuring the influence of the different nonlinear materials (liquids) and also Fresnel reflection contribution just setting the linear index of refraction. Taking into account the THG theory and the self-focusing effect contribution we were able to interpret the results and to estimate the nonlinearity of different solvents. As light source we have used an optical parametric amplifier (OPA) pumped by an amplified Ti:sapphire laser at 775 nm with 1 kHz repetition rate and 150 femtoseconds pulse duration. The OPA was set to deliver pulses at 1300 nm because neither the glasses nor the solvents present significantly absorption in the fundamental and TH wavelengths.

Keywords: Nonlinear optics. Third-harmonic generation. Self-focusing.

Referências:

1 BARBANO, E. C.; SIQUEIRA, J. P.; MENDONÇA, C. R.; MISOGUTI, L.; ZILIO, S. C. Broadband third-harmonic generation on interfaces using femtosecond pulses. **Proceedings of SPIE Photonics West**, v. 7917, p. 79170T-1-79170T-4, 2011.

2 BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Influence of self-focusing of ultrashort laser pulses on optical third-harmonic generation at interfaces. **Optics Letters**, v. 38, n. 23, p. 5165-5168, 2013.

PG20

Um novo método de RMN no domínio do tempo para identificação e caracterização de relaxações moleculares em sistemas orgânicos

BARBOSA, U.¹; DEAZEVEDO, E. R.¹

uilsonvx@gmail

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um importante objetivo do estudo de materiais poliméricos é estabelecer correlações entre a estrutura microscópica e dinâmica molecular e as propriedades macroscópicas dos materiais. Sólidos orgânicos, como sistemas poliméricos, exibem uma variedade de movimentos moleculares que influenciam nas propriedades mecânicas, de transporte, ópticas e dielétricas. Via técnicas de espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear de estado sólido, pode-se investigar movimentos segmentais e/ou mudanças conformacionais ocorrendo em um extenso intervalo de frequências (de Hz a MHz). (1) Isso pode ser feito para cada tipo de grupo molecular, permitindo identificar e caracterizar processos locais com grande precisão. Contudo, devido à aquisição de núcleos pouco abundantes, por exemplo ¹³C, uma desvantagem de espectroscopia de RMN de sólidos para aplicações em polímeros e biopolímeros é o longo tempo de medida, limitando muitas das aplicações. Neste sentido, o uso de RMN de ¹H no domínio do tempo em baixo campo (TD-NMR) tem sido cada vez mais comum, (2) pois, apesar da falta de seletividade em relação a grupos químicos, pode ser realizado em ampla faixa de temperatura e com boa sensibilidade. Ademais, o fato da interação dipolar magnética entre os núcleos ser drasticamente afetada pela presença de movimentos moleculares com frequências na faixa de dezenas de kHz, faz com que o sinal de RMN também o seja. Devido a esse potencial, trabalhos recentes focam na proposição de novos métodos de TD-NMR que permitam extrair o máximo de informação desses sistemas. No presente trabalho, propõe-se o uso da técnica de TD-NMR para identificar e caracterizar processos dinâmicos em sistemas orgânicos. A proposta baseia-se na combinação de filtros dipolares (DF), que suprimem o sinal de RMN oriundos de segmentos rígidos, com a aquisição de ecos obtidos utilizando a técnica de **Magic Sandwich Echo(MSE)**, que modulam a intensidade do sinal quando processos de dinâmica molecular com taxas na faixa de dezenas de kHz estejam presentes. Através da aquisição de um sinal onde se aplica o filtro dipolar e o echo MSE e de um sinal de referência usando somente o echo MSE, obtemos uma intensidade normalizada que, quando medida como função da temperatura, altera-se toda permitindo que um processo de dinâmica molecular na faixa de dezenas de kHz seja ativado. Tal normalização permite que o resultado seja extremamente robusto a imperfeições experimentais. Além disso, baseado nas teorias de Anderson e Weiss, (3) uma expressão matemática para o sinal normalizado pode ser deduzida tendo como parâmetros a energia de ativação dos processos dinâmicos e a distribuição das taxas de movimento. Isso permite que utilizando um simples ajuste aos dados experimentais tais parâmetros dinâmicos possam ser avaliados. A proposta foi testada em diversos tipos de polímeros e sistemas multifásicos, majoritariamente influenciados pela interação dipolar magnética, permitindo separar e caracterizar tanto movimentos moleculares locais (rotações de cadeias laterais e outros grupos específicos) como movimentos segmentais (transições vítreas, fusão de fases cristalinas).

Palavras-chave: TD-NMR. Processos dinâmicos. Interação dipolar.

Referências:

1 DEAZEVEDO, E. R. ; BONAGAMBA, T. J.; REICHERT, D. Molecular dynamics in solid polymers. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 47, n. 3, p. 137-164, 2005.

2 BARENWALD, R.; GOERLITZ, S.; GODEHARDT, R.; OSICHOW, A.; TONG, Q.; KRUMOVA, M.; MECKING, S.; SAALWACHTER, K. Local flips and chain motion in polyethylene crystallites: a comparison of melt-crystallized samples, reactor powders, and nanocrystals. **Macromolecules**, v. 47, n. 15, p.5163-5173, 2014.

3 ANDERSON, P. W.; WEISS, P.R. Exchange narrowing in paramagnetic resonance. **Reviews of Modern Physics**, v. 25, n. 1, 269-276, 1953.

PG21

Cultivo e isolamento de bactérias anaeróbias termofílicas de reservatório de petróleo, com interesse para espécies da ordem Thermotogales.

BARDIVIESSO, L. G.¹; BOSSOLAN, N. R. S.¹

bardiviesso@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Bactérias do gênero *Petrotoga*, pertencentes à ordem *Thermotogales*, foram descritas a partir de amostras de reservatórios de petróleo, sendo nativas destes ambientes extremos quanto à temperatura, pressão e salinidade. Estas bactérias apresentam uma estrutura característica envolvendo suas células, chamada toga. Dentre as seis espécies descritas neste gênero, a maioria produz enzimas que degradam diversas fontes de carbono, como arabinose, celobiose, galactose, xilana, xilose, entre outros carboidratos abundantes na natureza. O presente trabalho teve como objetivo isolar morfotipos desta ordem, a partir de amostras de dois reservatórios de petróleo terrestres na região do recôncavo Baiano, por meio de recuperação em cultivos anaeróbios. Dois dos isolados foram identificados e para um deles foram realizados testes de crescimento frente a diferentes variáveis como temperatura, salinidade e degradação de fontes de carbono. As espécies *Petrotoga mexicana* (DSM-14811) e *Petrotoga mobilis* (DSM-10674) foram utilizadas como parâmetros para o estudo de algumas variáveis. Na primeira etapa deste projeto foram feitos testes para seleção de meios de cultivo adequados ao isolamento deste gênero, sendo escolhidos os meios *P. mexicana* (1) e *P. olearia* (2), fazendo a correção da salinidade e da temperatura de incubação correspondente ao reservatório. A identificação dos isolados foi feita por técnicas de amplificação do DNAr16S, utilizando os primers B27f e U1492r, e sequenciamento, utilizando os primers M13f e M13r. As sequências recuperadas nos clones foram analisadas quanto à qualidade utilizando os programas Phred, Phrap e Consed, e comparadas na plataforma virtual BLASTn. As sequências mostraram identidade de 98% a 100% com as espécies *P. miotherma*, *P. halophila*, *P. mobilis* e *P. olearia*. Dois isolados, denominados MG414-03 e BA175-01, também tiveram sua identificação realizada por um laboratório especializado, onde foi confirmado que ambos possuem maior similaridade com a espécie *P. miotherma*, sendo 99,2% a 99,9% para MG414-03, e 99,4% a 99,7% para BA175-01, podendo esta ser uma nova espécie do gênero *Petrotoga*. O teste colorimétrico para verificação da degradação de fontes de carbono com o reagente DNS (3) foi padronizado para os substratos xilana e CMC (Carboxi Metil Celulose). Para esta padronização foram utilizadas as linhagens *Petrotoga mexicana* e *Petrotoga mobilis*. A degradação de xilana foi observada nas porções sobrenadante dos cultivos de ambas as espécies, verificando-se a concentração de $0,25 \pm 0,07$ g/L de glicose para *P. mexicana*, e $0,46 \pm 0,05$ g/L de glicose para *P. mobilis*. Houve degradação de CMC apenas na porção sobrenadante de *P. mobilis*, com valor de $0,26 \pm 0,08$ g/L de glicose. Ambos os controles de substrato mantiveram valores menores de concentração de glicose, sendo $0,16 \pm 0,06$ g/L para xilana e $0,05 \pm 0,05$ g/L para CMC. As condições ótimas de temperatura e salinidade para o cultivo do isolado MG414-03 foram determinadas, chegando-se a valores de 60°C e 18 g/L de NaCl, respectivamente. Estas duas condições estão sendo utilizadas nos cultivos com diferentes fontes de carbono (xilose, maltose, sacarose e xilana), tendo o meio *P. miotherma* como base. Estes testes estão em andamento e seus resultados serão apresentados no pôster.

Palavras-chave: Petróleo. *Petrotoga*. Enzimas termoestáveis.

Referências:

1 MIRANDA-TELLO, E.; FARDEAU, M.-L.; THOMAS, P.; RAMIREZ, F.; CASALOT, L.; CAYOL, J.-L.; GARCIA, J.-L.; OLIVER, B. *Petrotoga mexicana* sp. nov., a novel thermophilic, anaerobic and xylanolytic bacterium isolated from an oil-producing well in the Gulf of Mexico. **International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology**, v. 54, n. 1, p. 169-174, 2004.

2 L'HARIDON, S.; MIROSHNICHENKO, M. L.; HIPPE, H.; FARDEAU M.-L.; BONCH-OSMOLOVSKAYA, E. A.; STACKEBRANDT, E.; JEANTHON, C. *Petrotoga olearia* sp. nov. and *Petrotoga sibirica* sp. nov., two thermophilic bacteria isolated from a continental petroleum reservoir in western Siberia. **International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology**, v. 52, n. 5, p. 1715-1722, 2002.

3 MILLER, G. L. Use of dinitrosalicylic acid reagent for determination of reducing sugar. **Analytical Chemistry**, v. 31, n. 3, p. 426-428, 1959.

PG22

Dynamics of a bosonic Josephson junction subject to an artificial non-abelian gauge field

BARRETO, D. L.¹; SANTOS, F. E. A.²; BAGNATO, V. S.¹

diogolbar@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

We investigate the coherent dynamics of a Bose Einstein condensate in a double well, subject to an artificial non abelian gauge field generated using a laser techniques that adds a geometrical phase to the macroscopic wave function that describes the atomic cloud. We also derive the nonlinear Josephson equations (1) that allow us to understand the many body system in terms of a classical Hamiltonian (2) which describes the motion of two coupled non-rigid pendulum like system. Then we analyse the phase-space (3) trajectories of the system and use this to compare and understand how the presence of a synthetic gauge field affects the dynamics of a pseudospin $1/2$ system created by using two different atomic Zeeman levels. Finally we try to simplify the dynamics of the system using a particular transformation that totally eliminates the effects of our gauge field and allow us to work with analytical calculations in order to validate our numerical predictions.

Keywords: Synthetic gauge fields. Bosonic Josephson junction. Nonlinear dynamics.

Referências:

1 ISATIJA, I. I. et al. Symmetry-breaking and symmetry-restoring dynamics of a mixture of Bose-Einstein condensates in a double well. **Physical Review A**, v. 79, n. 3, p. 033616-1-033616-8, 2009.

2 GRASS, T. et al. Quantum phase transition of ultracold bosons in the presence of a non-Abelian synthetic gauge field. **Physical Review A**, v. 84, n. 5, p. 053632-1-053632-9, 2011.

3 QIU, H.; TIAN, J.; FU, L. B. Collective dynamics of two-species Bose-Einstein-condensate mixtures in a double-well potential. **Physical Review A**, v. 81, n. 4, p. 043613-1-043613-5, 2010.

PG23

Efeito da adição de dopantes e da rota de síntese nas propriedades do composto CaTiO_3

BARROS, K. L. P. de¹; MASTELARO, V. R.¹

klp.barros@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos materiais nanocristalinos, o processo de dopagem tem sido considerado de fundamental importância para estabilizar determinadas fases ou faces cristalinas. A busca por novos materiais também tem sido baseada no uso de novos métodos de síntese como, por exemplo, o método hidrotermal e solvotermal.(1) Desta forma, a introdução de dopantes simultaneamente com o uso de uma metodologia de síntese versátil mostra-se como uma proposta interessante para obter materiais já produzidos por técnicas convencionais, mas que apresentam propriedades diferenciadas. O objetivo do projeto é verificar o efeito do método de síntese utilizado e da adição de íons dopantes como Mg^{2+} , Ni^{2+} e Cd^{2+} nas propriedades morfológicas e estruturais do composto CaTiO_3 que será preparado através dos métodos hidrotermal e solvotermal sem o uso de microondas. Segundo o estudo realizado por Alfredsson (2) estes íons são os mais ativos em relação as mudanças de morfologia na fase CaTiO_3 . Até o momento, foram realizados experimentos verificando o efeito dos parâmetros de síntese (tempo e temperatura) e variando-se os precursores utilizados e a metodologia de síntese, além da caracterização por técnicas como difração de raios X e microscopia eletrônica de varredura. Futuramente, será verificado o efeito da substituição dos íons dopantes no sítio A (Ca) e no sítio B (Ti) assim como realizados testes sobre a atividade catalítica e da sensibilidade ao gás ozônio das amostras obtidas.

Palavras-chave: CaTiO_3 . Síntese hidrotermal e solvotermal. Dopantes.

Referências:

1 YANG, X.et al. Formation mechanism of CaTiO_3 hollow crystals with different microstructures. **Journal of the American Chemical Society**, v.132, n.4, p.14279-14287, 2007.

2 ALFREDSSON, M. et al. Dopant control over the crystal morphology of ceramic materials. **Surface Science**, v.601, n.2, p.4793-4800, 2007.

PG24

Cálculo dos parâmetros $k.p$ para semicondutores Ga-V na forma zinc blende .

BASTOS, C. M. O.¹; FARIA JUNIOR, P. E.¹; CAMPOS, T.¹; SIPAHI, G. M.¹

cmobastos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O cálculo de estruturas de bandas é essencial para o estudo e desenvolvimento de novas aplicações como, por exemplo, nanosensores e células solares mais eficientes. No estudo de materiais de baixa dimensionalidade, onde o sistema é descrito por uma super-cela composta por muitos átomos, o método $k.p$ se destaca devido ao baixo custo computacional quando comparado à métodos *ab-initio*. Por ser um método semi empírico, o $k.p$ necessita de parâmetros que descrevam corretamente o material analisado. Apesar da robustez do método $k.p$ para o cálculo de nanoestruturas, os parâmetros devem ser determinados por métodos auxiliares. Neste estudo, propomos um novo método para se obter tais parâmetros a partir de estruturas de bandas do material *bulk*, calculada por métodos *ab-initio*. Em uma primeira abordagem, obtemos a estrutura de bandas através do LmtArt, (1) um software-livre para cálculos *ab-initio* de estrutura eletrônica baseado no formalismo FP-LMTO para resolver as equações de Khan-Sham (DFT). Calculamos os parâmetros de semicondutores Ga-V na forma zinc blende através do método proposto e comparamos nossos resultados com: *fitting* parabólico em torno do ponto Γ , (2) um dos métodos mais utilizados na literatura; e valores experimentais. (3) O método proposto mostrou-se eficiente em gerar parâmetros que descrevem a estrutura de bandas em regiões próximas e distantes do ponto Γ .

Palavras-chave: Método $k.p$. Teoria do funcional da densidade. Parâmetros de massa efetiva.

Referências:

- 1 SAVRASOV, S. Y. Program LMTART for electronic structure calculations. **Zeitschrift fur Kristallographie**, v. 220, p. 555, 2005.
- 2 RAMOS, L.; TELES, L.; SCOLFARO, L.; CASTINEIRA, J.; ROSA, A.; LEITE, J. Structural, electronic, and effective mass properties of silicon and zinc blende group III nitride semiconductor compounds. **Physical Review B**, v. 63, n. 16, p. 165210, 2001.
- 3 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R.; RAM-MOHAM, L. R. Band parameters for III V compound semiconductors and their alloys. **Journal of Applied Physics**, v. 89, n. 11, p. 5815, 2001.

PG25

Sequências de ensino-aprendizagem baseadas na abordagem investigativa e uso de experimentos históricos em sala de aula

BATISTA, R. F. M.¹; SILVA, C. C.¹

tata.fis@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No Brasil as mudanças necessárias para a atualização dos currículos de física já são discutidas por pesquisadores das áreas de ensino de ciências há várias décadas. Entre os temas sugeridos estão o ensino de física através de uma abordagem histórico-filosófica, explorando a historicidade do conhecimento científico. (1) Diversos autores defendem a relevância e inclusão da dimensão histórica e filosófica na formação dos licenciandos, pois esta pode contribuir para evitar visões distorcidas sobre os processos e fatores envolvidos na construção do conhecimento científico, de seu método e de suas relações com os seus condicionantes sociais; proporcionar o desenvolvimento de atividades em sala de aula que favoreçam a aprendizagem de conceitos; entender melhor o processo ensino-aprendizagem de ciências, entre outras coisas. Além das razões acima, as reformas nas diretrizes educacionais no país presentes em documentos como os PCN e PCN+ para o Ensino Médio, apontam para a necessidade de contextualização sociocultural do conhecimento científico, visando, entre outras coisas, a formação de indivíduos críticos e com autonomia intelectual, aptos a construir julgamentos de valores acerca da realidade contemporânea fortemente influenciada pela ciência e tecnologia. (2) Explorar a historicidade do conhecimento científico no ensino da Física não é algo simples e os vários aspectos envolvidos precisam ser mais bem investigados. Além da pesquisa histórica e epistemológica, a investigação acerca dos aspectos didático-metodológicos é fundamental para fundamentar como abordagens históricas podem ser inseridas no processo educacional. (3) No presente projeto de pesquisa, propomos desenvolver sequências de ensino aprendizagem que explorem a historicidade do conhecimento científico na formação de professores em três dimensões: científica, metacientífica e pedagógica. A sequência de ensino aprendizagem que será utilizada será o ensino investigativo, que atua de forma que o aluno é o centro do aprendizado, investigando o problema introduzido pelo professor e refletindo até o entendimento, levando-o a aprender e a pensar por ele mesmo. Esse tipo de ensino aprendizagem faz com que o aluno reflita sobre o problema proposto, indague, explore, discuta ideias, colete dados, analise dados, critique, conteste e argumente para assim, obter uma resolução do problema proposto. Esperamos, com isso, que tanto alunos quanto professores trabalhem juntos para um objetivo em comum: o entendimento da natureza científica.

Palavras-chave: Ensino investigativo. História da ciência. Atividades experimentais.

Referências:

1 SILVA, C. C.; MARTINS, R. A. A teoria das cores de Newton: um exemplo do uso da história da ciência em sala de aula. **Ciência e Educação**, v. 9, n. 1, p. 53-65, 2003.

2 BRASIL. Ministério da Educação. Secretaria de Educação Básica. **PCN+ Ensino Médio**: orientações



educacionais complementares aos parâmetros curriculares nacionais: ciências da natureza, matemática e suas tecnologias. Brasília, 2002.

3 HÖTTECKE, D.; SILVA, C. C. Why implementing history and philosophy in school science education is a challenge: an analysis of obstacles. **Science and Education**, v. 20, n. 3-4, p. 293-316, 2011.

PG26

Studies of *Naegleria gruberi* Selenophosphate Synthetase (SPS) involved in eukaryotes selenocysteine insertion machinery

BELLINI, N. K.¹; SILVA, I. R.¹; SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹

nataliabellini@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Selenocysteine (Sec), the 21st amino acid, is present in selenoproteins, whose function in cell growth, proliferation and redox balance have been described indicating that it contributes to *Naegleria gruberi* survival. Sec biosynthesis require a complex pathway and it is incorporated at an in frame UGA codon defined by an mRNA secondary structure called Sec Insertion Sequence Element (SECIS) (1). All potential genes involved in selenocysteine pathway were identified in *Naegleria gruberi* genome, a basal unicellular eukariote belonging to the Jakobs Euglena Heteroloboseans (JEH) group. Among the identified proteins is selenophosphate synthetase (SPS), the enzyme that catalyzes the formation of monoselenophosphate, a highly reactive reduced selenium donor compound produced from adenosine 5'-triphosphate (ATP) and selenide. (2) In *N. gruberi* SPS is expressed as a gene fusion of two domains, the C-terminal domain exhibit identity with other SPS described and it is essential to selenocysteine incorporation. The N-terminal domain possess similarity with unicellular algae methyltransferases and probably is involved in cell detoxification. Constructs using the full length gene (*sps.fl*) and the C-terminal domain (*sps.d*) were cloned into pET32a(+) vector and expressed in *Escherichia coli* BL21 (DE3) cells. The C-terminal domain was analyzed by gel electrophoresis in native, nondenaturing conditions, and by dynamic light scattering (DLS). A 100KDa protein was observed, consistent with a dimer in solution (approximately 47KDa per monomer). This result is consistent with SPS homologues of *Trypanosoma brucei* and *Escherichia coli*. SPS.D biophysical characterization also involved analyses by circular dichroism (CD) to elucidate the protein structural elements and small-angle X-ray scattering (SAXS) to obtain information such as radius of gyration (Rg) and molecular mass. SPS.FL expression and purification has been performed using a His Trap HP column (GE) and is present in the insoluble fraction. Polyclonal anti-rabbit antibodies were produced against *N. gruberi* SPS.D and SPS.FL for immunolocalization experiments and the characterization of the gene products along the developmental stages of *N. gruberi*. Thus, these preliminary findings bring a new perspective to the study of the origin and evolution of the selenocysteine incorporation machinery, and in particular may bring alternative roles to the SPS protein by investigating its association with methyltransferase, besides contributing to the comparative understanding of the pathway between the three domains of life.

Keywords: Selenophosphate synthetase. *Naegleria gruberi*. Selenoprotein.

Referências:

1 JOHANSSON L.; GAFVELIN, G.; ARNER, E. S. J. Selenocysteine in proteins: properties and biotechnological use. **Biochimica et Biophysica Acta**, v. 1726, n. 1, p. 1-13, 2005.

2 SILVA, M. T. A.; CALDAS, V. E. A.; COSTA, F. C.; SILVESTRE, D. A. M. M.; THIEMANN, O. H. Selenocystein biosynthesis and insertion machinery in *Naegleria gruberi*. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 188, n. 2, p. 87-90, 2013.

PG27

Engenharia de reservatórios térmicos na teoria do laser

BERGOC, I. C.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

itaua.bergoc@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A teoria do laser, o processo de amplificação óptica por emissão estimulada da radiação, consiste num dos principais alicerces da óptica quântica. (1) Se na teoria do laser a dinâmica incoerente associada à ação do meio ambiente (ou reservatório térmico) desempenha papel central, muito do que tem sido recentemente realizado em Óptica Quântica, centra-se exatamente no desenvolvimento de procedimentos que inibem a ação (inevitável) do meio ambiente. De fato, nas últimas décadas, sistemas da óptica quântica passíveis de significativo controle experimental (como a eletrodinâmica quântica de cavidades e os íons aprisionados) foram largamente requisitados para a investigação dos princípios fundamentais da mecânica quântica e para a implementação do processamento de informação quântica, tarefas que exigem alto grau de coerência. Além da utilização dessas plataformas quânticas nas quais a ação do meio ambiente é, de várias formas, mitigada, apresentou-se também uma ampla variedade de técnicas para o controle da ação do meio ambiente; dentre as quais mencionamos a engenharia de reservatórios, o desacoplamento dinâmico, os subespaços livres de decoerência e a utilização de sistemas não-estacionários para o enfraquecimento do acoplamento sistema-meio ambiente. Neste trabalho pretendemos associar a teoria do laser às técnicas de controle da ação do meio ambiente. Com isso pretendemos investigar a possibilidade de manipulação da radiação laser através da utilização dos diferentes protocolos para a engenharia de reservatórios térmicos. Ressaltamos que as técnicas acima mencionadas para o controle da ação do meio ambiente foram até então requisitadas unicamente para a proteção da coerência de estados quânticos. Pretendemos alargar as possibilidades de aplicação destas técnicas revisitando, paradoxalmente, a teoria do laser, na qual a ação do meio ambiente consiste exatamente na pedra angular para a produção de luz coerente.

Palavras-chave: Teoria do laser. Engenharia de reservatórios. Coerência quântica.

Referências:

1 CARMICHAEL, H. **An open systems approach to quantum optics**. Berlin: Springer-Verlag, 1993. (Lecture Notes in Physics Monographs, v. 18).

PG28

Information on crystallinity index in cellulose of sugarcane biomass submitted to acid/alkaline pretreatment and enzymatic treatment via new model data analyze using solid-state NMR

BERNARDINELLI, O. D.¹; LIMA, M. A.¹; REZENDE, C. A.¹; POLIKARPOV, I.¹; AZEVEDO, E. R.¹

oigres.daniel@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Characterization of lignocellulosic biomass to produce multi-products such as ethanol and other biomaterial is usually done using spectroscopic techniques like ¹³C solid-state nuclear magnetic resonance (SSNMR) and X-ray diffraction (XRD). These techniques have enabled knowledge of changes in the chemical structure on lignocellulosic biomass and its modifications in the crystalline and chemical composition of sugarcane bagasse submitted to specific pretreatment. The pretreatment is responsible for the successful use of lignocellulosic biomass feedstock in ethanol production and SSNMR is regarded as one of the best tools for elucidating structures of lignocellulosic biomass. (1-3) Whilst XRD is one of the best tools using in elucidating crystallinity of cellulose. The primary SSNMR technique that has been used so far is the routine ¹³C cross polarization-magic angle spinning (CPMAS) technique. Although this technique has markedly advanced our understanding of lignocellulosic biomass, but full potential of SSNMR for characterizing these samples has yet to be realized. Recent technical developments and applications of advanced SSNMR have revealed the promise deeper insights into structures of lignocellulosic biomass. In this work, firstly we investigate modifications in the crystallinity, comparing the results with XRD experiments, and chemical composition of sugarcane bagasse submitted to a two-step treatment, using diluted acid followed by a delignification process with increasing sodium hydroxide concentrations by specific SSNMR protocol. This protocol, before and after the pretreatment, is based spectral subtraction of lignin signals on lignocellulosic biomass firstly submitted to a process of removing hemicellulose and it show that hemicelluloses and lignin are degraded using diluted acid followed by a delignification process, without changing crystallinity of cellulose. Next we have compared the pretreatment result with sugarcane bagasse submitted on enzymatic hydrolysis before and after two-step treatment. As well as in two step pretreatment the enzymatic hydrolyze treatment, also indicate no change in CI of cellulose.

Palavras-chave: Solid-state nuclear magnetic resonance. Lignocellulose biomass. Ethanol produce.

Referências:

1 REZENDE, C. A. et al. Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility. **Biotechnology for Biofuels**, v. 4, n. 54, p.1-18, 2011.

2 LIMA, M. A. et al. Effects of pretreatment on morphology, chemical composition and enzymatic digestibility of eucalyptus bark: a potentially valuable source of fermentable sugars for biofuel production - part 1. **Biotechnology for Biofuels**, v. 6, p. 75, 2013. doi:10.1186/1754-6834-6-75.



3 LIMA, M. A. et al. Evaluating the composition and processing potential of novel sources of Brazilian biomass for sustainable biorenewables production. **Biotechnology for Biofuels**, v. 7, p. 10, 2014. doi:10.1186/1754-6834-7-10.

PG29

O limite termodinâmico do modelo de Axelrod unidimensional de dois estados

BIRAL, E. J. P.¹; FONTANARI, J. F.¹

eliasbiral@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Meu projeto de mestrado consiste em explicar uma discrepância entre os resultados de umas simulações computacionais e um desenvolvimento analítico-matemático do modelo de Axelrod unidimensional. Este modelo de disseminação cultural está exposto, em sua forma bidimensional, no artigo (1) e os desenvolvimentos matemáticos estão em (2-3) Devo, para tal, desenvolver simulações computacionais em linguagem C de modo a reproduzir os resultados de Axelrod e dominar a matemática probabilística que Lanchier utiliza para entender seus artigos. O modelo de disseminação cultural consiste na interação de um grupo de agentes localizados nos sítios de uma rede regular que exibem um conjunto de características culturais cada uma contendo estados distintos. O modelo de Axelrod caracteriza-se por apresentar homofilia, ou seja, quanto mais características em comum dois agentes apresentarem, maior sua chance de interação. Ao final da interação, observa-se o surgimento de regiões com características idênticas chamados de domínios culturais. No modelo unidimensional, observa-se que a modelagem analítico-matemática mostra convergência para um regime monocultural, ou seja, todos os agentes são idênticos. Por outro lado, a simulação computacional mostra divergência ou polarização, ou seja, a configuração absorvente da dinâmica exibe diversos domínios culturais distintos. Já consegui desenvolver um programa em linguagem C que é capaz de reproduzir os resultados do modelo de Axelrod na rede quadrada bidimensional. Agora, estou na fase de aprendizagem da matemática probabilística que Lanchier utiliza em seus artigos e também estou escrevendo um programa para simular o modelo de Axelrod com os agentes localizados em sítios de um anel. Como parte do desenvolvimento matemático, estou cursando a disciplina *Tópicos em teoria de processos estocásticos* que meu orientador está ministrando. Os resultados até então encontrados estão em acordo com os apresentados no artigo original, (1) tendo sido reproduzidas as figuras 1 e 2 e a tabela 2 deste artigo com boa aproximação. Ainda é preciso desenvolver o entendimento matemático e terminar o código da simulação unidimensional para, somente então, atacar o problema principal de minha dissertação. Isto é esperado para os próximos meses.

Palavras-chave: Mecânica estatística. Modelo de Axelrod. Partículas interagentes.

Referências:

1 AXELROD, R. The dissemination of culture; a model with local convergence and global polarization. **Journal of Conflict Resolution**, v. 41, n. 3, p. 203 - 226, 1997.

2 LANCHIER, N. The Axelrod model for the dissemination of culture revisited. **Annals of Applied Probability**, v. 22, n. 2, p. 860 - 880, 2012.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 LANCHIER, N.; SCHWEINSBERG, J. **Consensus in the two-state Axelrod model**. 2011. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1107.4413>>. Acesso em: 05 maio 2014.

PG30

Não-linearidade e emaranhamento quântico em sistemas optomecânicos

BRAGA, R.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

rods@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O emaranhamento quântico, fenômeno que ocorre quando o estado de duas (ou mais) partículas é tal que não pode ser determinado separadamente, é uma forte assinatura da natureza quântica do universo e constitui a base das pesquisas em informação e computação quântica. A interpretação deste fenômeno foi fonte de discussões entre grandes físicos (1-2) no início do século passado e continua a intrigar equipes de diversas áreas. A matemática da mecânica quântica é baseada em espaços lineares, enquanto o mundo clássico é fundamentalmente não-linear. O emaranhamento é um fenômeno puramente quântico, isto é, não há análogo deste em sistemas clássicos. Contudo, é possível observar emaranhamento em sistemas optomecânicos que passaremos a descrever agora. Um sistema optomecânico consiste de uma cavidade óptica e um oscilador nanomecânico. Quando um feixe de laser é direcionado à cavidade, um campo óptico ressonante é estabelecido o qual exerce força contra as paredes da cavidade, fazendo com que o oscilador nanomecânico oscile. As oscilações mecânicas causam variações no comprimento da cavidade, logo, em sua frequência de ressonância. Deste modo, há um acoplamento entre os graus de liberdade ópticos e mecânicos. Este acoplamento optomecânico mostra uma maneira de emaranhar os modos ópticos e mecânicos e isso possui implicações profundas para as áreas de informação e computação quântica. (3) Nosso objetivo é estudar como a intensidade do emaranhamento optomecânico observado varia conforme o regime de parâmetro escolhido para o experimento. Investigações futuras podem levar à traçar correlações entre sistemas optomecânicos no regime caótico e o emaranhamento quântico.

Palavras-chave: Emaranhamento. Sistemas não-lineares. Sistemas optomecânicos.

Referências:

1 EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. . Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?. **Physical Review**, v.47, p.777, May 1935.

2 BOHR, N. . Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?. **Physical Review**, v.48, p.696., Oct.1935.

3 WANG, G. et al. Nonlinear dynamics and quantum entanglement in optomechanical systems. **Physical Review Letters**, v.112, p.110406, 2014. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.110406>.

PG31

Processing and characterization of plasmonic nanostructures

BRATIFICH, R.¹; MAREGA JUNIOR, E.¹

bratifich@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The confinement and the transport of the light below the diffraction limit allow the study of matter at the nanoscale through spectroscopy techniques. Besides the development of new devices for the detection and quantification of organic, inorganic and biological compounds. The Localized surface plasmon resonance (LSPR) in nanostructures results in an enhancement of the local field with specific polarization which can be detected in the far-field. The variation of the refractive index of the medium promotes change in polarization and a shift from the original spectrum of the structure in response to this change. The geometry of plasmonic nanostructure can increase or decrease the sensitivity and resolution of the device owing to physical phenomenon of polarizability in these nanostructures.(1) Lithographic techniques - such as optical, electron and ion beam lithography - allow the fabrication of nanostructures. The study of the steps involved in the manufacturing of nanodevices enables improvement of the process and optimization of nanostructures, making them more efficient and complex for the increasing the phenomenon of polarizability in these nanostructures. In this work we present the stages of the nanofabrication of plasmonic structures and their characterization for the important parameters definition for the design of structures for various applications. For this analysis we manufactured a set of slits arrays which consisting in a set of 25 slits with 10 μm of length, 100 nm of width, 200 nm of deep with a period of 400 nm using a FEI-FIB Quanta 3Di on gold and silver thin films 200 nm thick deposited on BK7 substrates. These structures were analyzed using micro-transmission in visible range using a spectrometer attached to an optical microscope.

Keywords: Plasmonic. Localized surface plasmon resonance. Nanostructure.

Referências:

1 CHUN, H.; CHUNG, T.; LEE, B.; LEE, S. Y.; SONG, E. Y. Plasmonic nanostructures for nano-scale bio-sensing. **Sensors**, v. 11, n. 11, p. 10907-10929, 2011.

PG32

Desenvolvimento de um sistema unilateral de RMN para aplicação em meios porosos

BRAZ, D. C.¹; VIDOTO, E. L. G.¹; AMORIM, A. D. F.¹; BONAGAMBA, T. J.¹

dcbraz@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde sua proposição em 1945, a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) vem se desenvolvendo como um campo de pesquisa inesgotável, fornecendo informações ao nível molecular em diversas áreas como a física, química, biologia e medicina, tendo sua aplicação cada vez mais ampliada pelo avanço das técnicas e dos equipamentos de RMN. Uma nova evidência desse fato é a possibilidade de realização de experimentos de RMN in situ (e.g. em formações rochosas, poços de petróleo, lençóis freáticos, ossos, etc.), em função do desenvolvimento de sistemas unilaterais de RMN. (1) Em geral, isso se deve ao pequeno porte desses sistemas, que se traduz em portabilidade, e aos campos magnéticos estáticos ($B_0 \approx 5 \text{ kG}$) e de radiofrequência (rf) gerados externamente. Esses sistemas unilaterais de RMN são compostos basicamente por um magneto permanente unilateral (fonte de B_0) e uma bobina de rf superficial (utilizada para excitação e detecção), ambos acoplados a um console de RMN. Um atributo importante desses magnetos unilaterais é, além da geração do campo B_0 , a presença natural de intensos gradientes de campo magnético ($\approx 1,5 \text{ kG/cm}$), que, em conjunto com bobinas de rf, permitem: (i) a excitação seletiva de diferentes profundidades da amostra e (ii) o controle da espessura da fatia a ser excitada. Pelo forte interesse do Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução (LEAR) em pesquisa e desenvolvimento de sistemas de RMN, e pela grande aplicabilidade em Ciência do Petróleo - Meios Porosos, o sistema unilateral de RMN foi escolhido como tema de doutorado deste autor. O trabalho envolve o desenvolvimento em duas frentes. Em uma delas, está sendo utilizado um magneto unilateral comercial (BRUKER), equipado com uma bobina de rf superficial, em conjunto com o console portátil modelo LapNMR (Tecmag). O conjunto magneto-bobina de rf desse sistema unilateral já foi plenamente caracterizado e o equipamento como um todo está sendo empregado para o estudo de compostos padrão e meios porosos artificiais e reais. Na outra frente do trabalho, está sendo desenvolvido um magneto unilateral para a mesma finalidade. Como esses magnetos não são mais comercializados individualmente, essa etapa do projeto tomou proporções estratégicas para o LEAR. Para o desenvolvimento do magneto unilateral, estão sendo utilizadas ferramentas computacionais baseadas no método dos elementos finitos. (2) Em termos das perspectivas de utilização do sistema unilateral de RMN em desenvolvimento, destacamos a montagem de uma ferramenta de perfilagem de poço de petróleo (Well Logging) (3) em escala de laboratório.

Palavras-chave: RMN unilateral. Meios porosos. Ciência do petróleo.

Referências:

1 CASANOVA, F.; PERLO, J.; BLÜMICH, B. **Single-sided NMR**. Heidelberg: Springer-Verlag, 2011.

2 JIN, J. **The finite element method in electromagnetics**. New York: Wiley, 1993.

3 COATES, G. R.; XIAO, L.; PRAMMER, M. G. **NMR logging: principles and applications**. Houston: Halliburton Energy Services, 1999.

PG33

Nanostructured biosensors for adiponectin hormone detection and investigation on its correlation with diabetes Mellitus type

BRAZACA, L. C.¹; JANEGITZ, B. C.²; BERNARDI, J. C.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

laiscbrazaca@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Obesity has increased dramatically in the last few years, becoming the biggest risk factor for the development of cardiovascular diseases, several types of cancer, as well as Diabetes *mellitus* type 2 (DM 2) (1). The association between obesity and the development of DM 2 can be partially explained by the decrease in the secretion, by adipose tissue, of the hormone adiponectin (adipoQ) (2), which displays anti-inflammatory and insulin sensitizing properties (3). Currently, the quantification of adiponectin is usually performed by ELISA, demanding time and specialized researchers. Therefore, the development of trustable and simple diagnostic tools for adiponectin quantification is of high importance. In this project, we developed an electrochemical biosensor for detection and quantification of adiponectin based on electrodes containing adipoQ transmembrane receptors adipoR1/adipoR2. The biological agents were immobilized on gold, using EDC/NHS (1-ethyl-3-(3-dimethylaminopropyl)carbodiimide)/N-hydroxysuccinimide) with 3-mercaptopropionic acid as crosslinkers. By using cyclic voltammetry, we obtained a linear decrease in the oxidation peak current of potassium ferricyanide in the range of 10^{-8} to 7.5×10^{-7} mol.L⁻¹ of adiponectin ($R^2 = 0.992$). The sensor presented great stability and a detection limit of 7×10^{-9} mol.L⁻¹. We now plan to apply the sensor device to human serum samples from patients in different health conditions, identifying potential pre-diabetic individuals. In summary, it was possible to quantify adiponectin in a fast, simple and low-cost way.

Keywords: Biosensor. Adiponectin. Diabetes.

Referências:

- 1 World Health Organization. **Obesity:** preventing and managing the global epidemic: report of a WHO consultation . Geneva: World Health Organization, 2000. 252 p.
- 2 WAJCHENBERG, B. L. Subcutaneous and visceral adipose tissue: their relation to the metabolic syndrome. **Endocrine Reviews**, v. 21, n. 6, p. 697-738, 2000.
- 3 HEMSDORFF, H. H. M.; MONTEIRO, J. B. R. Gordura visceral, subcutânea ou intramuscular: onde está o problema?. **Arquivos Brasileiros de Endocrinologia e Metabologia**, v. 48, n. 6, p. 803-11, 2004.

PG34

Estudos de biologia molecular estrutural da enzima FoID de *Xanthomonas albilineans*: alvo biológico para a descoberta de novos agroquímicos

BUENO, R. V.¹; MALUF, F. V.¹; GUIDO, R. V. C.¹

renata.bueno@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O uso de fontes renováveis para geração de energia limpa constitui um dos objetos de pesquisa fundamentais do desenvolvimento sustentável. Nesse contexto, a cana-de-açúcar consiste na principal fonte de energia renovável. (1) No entanto, o cultivo e a produtividade da cana-de-açúcar são influenciados por diversos fatores, entre os quais se destacam fitopatologias como a escaldadura das folhas. A escaldadura das folhas, causada pela bactéria *Xanthomonas albilineans* (Ashby) Dowson, é uma das cinco fitopatologias mais importantes que atingem a cana-de-açúcar, resultando em significativa diminuição da produtividade, necessidade de reforma precoce dos canaviais e queda da qualidade do caldo extraído. (2) A ausência de agentes químicos ou biológicos para o controle somado ao impacto dessa fitopatologia estimula a pesquisa de moléculas bioativas candidatas a novos defensivos agrícolas. Devido à função essencial que desempenha na via de biossíntese de folatos, precursores de purinas e pirimidinas essenciais à replicação bacteriana, a enzima N5,N10-metilenotetrahidrofolato desidrogenase-ciclohidrolase de *X. albilineans* (*Xa* FoID) foi eleita como alvo molecular. Para a elucidação da estrutura tridimensional da *Xa*FoID e a descoberta de inibidores potentes e seletivos como candidatos a novos agroquímicos, estudos integrados em Biologia Molecular Estrutural e Química Medicinal estão sendo conduzidos. A sequência codificante de *Xa*FoID, amplificada por PCR a partir do DNA genômico de *X. albilineans*, foi clonada em três diferentes vetores de expressão (pETM11, pETTrx-1a e pETNus-1a) empregando o sistema de Clonagem Independente de Ligação (LIC). (3) As construções resultantes foram utilizadas para a transformação de células de expressão *E. coli* Rosetta (DE3), e a avaliação do perfil de expressão das frações solúveis de *Xa*FoID para os diferentes vetores resultou na seleção da construção *Xa*FoID-6xHisTrx para expressão em maior escala. Em seguida, foi estabelecido um protocolo eficiente para a purificação de *Xa*FoID utilizando etapas sequenciais de cromatografia por afinidade e de exclusão molecular. Para cada litro de expressão foram obtidos 60 mg de proteína com elevado teor de pureza (> 95%). A triagem de condições de cristalização para *Xa*FoID foi conduzida a 18 °C (3 mg/mL, 5 mg/mL, 7,5 mg/mL e 10 mg/mL de *Xa*FoID) empregando-se a técnica de difusão de vapor e matriz esparsa. Aproximadamente, 4.200 experimentos foram realizados utilizando kits comerciais da Hampton Research (Index; Crystal Screen e Crystal Screen Cryo), Qiagen (Classic; Classic II; PEGs; JCSG Core Suite I, II, III e IV) e Molecular Dimensions (Morpheus). Experimentos preliminares de difração de raios X conduzidos na linha MX2 do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron do Brasil (LNLS) confirmaram que o padrão de difração observado é de proteína. Atualmente, as condições mais promissoras de cristalização estão sendo exploradas utilizando concentrações distintas de agente precipitante e soluções (Tris-HCl, cacodilato e HEPES a 0,1M; pH 5,5-7,5) visando obter cristais adequados para a difração de raios X. A elucidação estrutural do alvo molecular e o desenvolvimento de bioensaios padronizados são etapas essenciais da estratégia moderna de descoberta e o planejamento de novos compostos bioativos como candidatos a

agroquímicos.

Palavras-chave: Cana-de-açúcar. Escaldadura das folhas. *Xanthomonas albilineans*.

Referências:

1 SOUZA, E. L.; MACEDO, I. C. **Etanol e bioeletricidade:** a cana de açúcar no futuro da matriz energética. São Paulo: Luc Projetos de Comunicação Ltda, 2010.

2 BIRCH, R. . *Xanthomonas albilineans* and the antipathogenesis approach to disease control. **Molecular Plant Pathology**, v. 2, n. 1, p 1-11, 2001.

3 ASLANIDIS, C.; DE JONG, P. J. Ligation independent cloning of PCR products (LIC PCR) . **Nucleic Acids Research**, v. 18, n. 20, p 6069-6074, 1990.

PG35

Análise por fluorescência de diferentes fotossensibilizadores no modelo tumoral de membrana corioalantóica para aplicação da terapia fotodinâmica

BUZZÁ, H. H.¹; ZANGIROLAMI, A. C.¹; BAGNATO, V. S.¹; KURACHI, C.¹

hilde.buzza@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica (PDT, do inglês Photodynamic Therapy) é uma alternativa para o tratamento de diversas doenças, incluindo o câncer e é baseada na interação entre luz de um comprimento de onda específico, uma substância fotossensível e o oxigênio molecular. (1) O fotossensibilizador é ativado pela luz e reage com o oxigênio, resultando em espécies reativas, que são citotóxicas e levam à morte celular. (2) O modelo de membrana corioalantóica em ovos de galinha (CAM, do inglês Chorioallantoic Membrane) é considerado um método sem causar qualquer dor aos animais e permite acesso direto aos vasos sanguíneos. Esse ambiente, previamente vascularizado, permite o desenvolvimento de um tumor e o entendimento individualizado da interação do fotossensibilizador tanto com os vasos sanguíneos quanto com as células tumorais. (3) Se o fotossensibilizador possui uma fluorescência diferente das outras estruturas do modelo, é possível acompanhar sua difusão pelos vasos sanguíneos até atingir o tumor e determinar, portanto, o melhor tempo de incubação para a aplicação da PDT. Para isso, foram usados diferentes fármacos: o ALA, precursor da protoporfirina IX (pPIX), que é um fotossensibilizador já usado na clínica para tratamento de diversos tipos de câncer e o Photogem[®], um fotossensibilizador também já aprovado para tratamento de algumas lesões. A forma de aplicação foi variada em tópica e intravenosa e foram feitas imagens por fluorescência a cada 30 minutos imediatamente após aplicação do FS até 48 horas após, para determinação do melhor tempo de incubação. Determinado 4 horas para a aplicação tópica, foi aplicada a luz com um laser de diodo (QuantumTech[®]) em 635 nm com $100mW/cm^2$ durante 10 minutos, totalizando uma dose de $60J/cm^2$. As áreas de interesse na imagem foram selecionadas e submetidas a uma rotina do software Matlab[®] para quantificação da fluorescência ao longo do tempo desenvolvida especialmente para esse fim. Para os grupos controle (sem aplicação da luz), houve um aumento da fluorescência por todo o tempo da análise. Com o uso do ALA, foi possível acompanhar a formação da pPIX nos vasos sanguíneos e no tumor, mostrando a viabilidade dessas células, uma vez que ela precisa estar ativa para que essa produção aconteça. Com a aplicação da PDT houve o consumo do fotossensibilizador para ambos os compostos e uma destruição da malha vascular ao redor do tumor, mostrando grande potencial de tratamento para o câncer. Sendo um dos elementos fundamentais para que a PDT aconteça, o entendimento de como o fotossensibilizador interage com o tumor e com os vasos sanguíneos é um dos caminhos para a melhoria direta na aplicação clínica dessa modalidade terapêutica.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Membrana corioalantóica. Fotossensibilizador.

Referências:

1 FINGAR, V. H. Vascular effects of photodynamic therapy. **Journal of Clinical Laser Medicine and**

Surgery, v. 14, n. 5, p. 323-328, 1996.

2 WILSON, B. C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. R61-R109, 2008.

3 BALKE, M.; NEUMANN, A.; KERSTING, C.; AGELOPOULOS, K.; GEBERT, C.; GOSHEGER, G.; BUERGER, H.; HAGEDORN, M. Morphologic characterization of osteosarcoma growth on the chick chorioallantoic membrane. **BMC Research Notes**, v. 58, n. 3, p. 1-8, 2010.

PG36

Dispositivo fotovoltaico de heterojunção utilizando nanofios de GaAs/AlGaAs/GaAs com polímero PPV

CAFACE, R. A.¹; GUIMARÃES, F. E. G.¹

raphaelcaface@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Dispositivos fotovoltaicos baseados em polímeros conjugados são utilizados nos últimos anos para a produção de células de energia solar com baixo custo. Para que haja uma alta eficiência é necessária uma grande dissociação de éxciton (1) e alta fotocorrente, por isso é importante conhecer os níveis de energias (2) dos componentes do dispositivo fotovoltaico, e estudos recentes mostraram que estruturas organizadas por nanofios de GaAs AlGaAs GaAs recobertas com polímeros conjugados (3), são um opção para esta a fabricação destes dispositivos. O polímero PPV (poli-fenileno vinileno) funcionará como coletor de luz, pois o mesmo apresenta alto coeficiente de absorção óptica e é facilmente organizado em filmes finos. Este material orgânico fotoativo será depositado sobre nanofios GaAs (arseneto de galio), que atuará como um forte receptor de elétrons (alta afinidade eletrônica) e conduzirá os elétrons pelos nanofios, favorecendo um melhor transporte para fora do dispositivo. Uma vez que na maioria dos semicondutores orgânicos o comprimento de difusão dos éxcitons, varia de 5 a 15 nm, serão necessários uma alta densidade de nanofios de GaAs, a fim de melhorar a dissociação dos éxcitons na interface híbrido. Para obtermos a estrutura de nanofios utilizaremos o MBE (Molecular Beam Epitaxy) para crescer o GaAs e depois encapsularmos com AlGaAs(arseneto de galio e alumínio). A fotoluminescência AlGaAs GaAs demonstrou que os elétrons estão confinados no núcleo de GaAs, e esta interface, AlGaAs GaAs, estabelece condições para a separação mais eficiente de cargas entre o polímero e os nanofios, tornando esta heterojunção bastante promissora na fabricação dos dispositivos fotovoltaicos.

Palavras-chave: Nanofios de arsenieto de galio. Dispositivos fotovoltaicos. Eletrônica orgânica.

Referências:

- 1 GUIMARÃES, F. E. G.; CAFACE, R. A.; ARAKAKI, H.; SOUZA, C. A.; PUSEP, Y. A. Dynamics of photoexcited carriers in the presence of disorder in radial heterostructured GaAs AlGaAs GaAs nanowires. **Applied Physics Letters**, v. 103, n. 3, p. 033121-1033121-3, 2013.
- 2 CAFACE, R. A.; GUIMARÃES, F. E. G.; ARAKAKI, H.; SOUZA, C. A.; PUSEP, Y. A. Photoluminescence of radial heterostructured GaAs AlGaAs GaAs nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 113, n. 6, p. 064315-1-064315-4, 2013.
- 3 FACCHETTI, A. Polymer donor-polymer acceptor (all-polymer) solar cells. **Materials Today**, v. 16, n. 4, p. 123-132, 2013.

PG37

Study and development of spherical harmonics based methods for ligand similarity analysis

CAIRES, F. R.¹; MONTALVÃO, R. W.¹

fernando.caires10@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Molecular recognition is the force that drives all process in human body and life, being essential to understand how protein-protein and protein-ligand interacts, there are lots of possibilities to describe these interactions, here we focus in molecular descriptors. Molecular descriptors are essential for many applications in computational chemistry and physics, such as ligand-based similarity searching. Spherical harmonics are Legendre's Equation solution in spherical coordinates and have previously been suggested as comprehensive descriptors of molecular structure(1) and properties, because they are rotationally invariant, orthonormal and unique descriptors(2) of a molecular shape. Here we describe a method where a ligand, with extension .pdb, is inputted in our website, the descriptors are calculated(3) and compared in database, containing all DUD-E ligands searching for similar structures, we compare them using Euclidian Distance because spherical harmonics metric's is L^2 . We investigate a spherical harmonics based method for ligand similarity analysis in order to enhance and make drug design process more robust.

Keywords: Spherical harmonics. Shape descriptor. Ligand analisys.

Referências:

1 MORRIS, R. J. An evaluation of spherical designs for molecular-like surfaces. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 24, n. 5, p. 356-361, Mar. 2006.

2 RITCHIE, D. W.; KEMP, G. J. L. Fast computation, rotation, and comparison of low resolution spherical harmonic molecular surfaces. **Journal of Computational Chemistry**, v. 20, n. 4, p. 383-395, Mar. 1999.

3 GREEN, R. **Spherical harmonic lighting**: the gritty details. Disponível em: <<http://www.cs.columbia.edu/~cs4162/slides/spherical-harmonic-lighting.pdf>>. Acesso em: 20 jan. 2014.

PG38

Decifrando a estrutura da interação regulador-DNA

CAMARA, A. S.¹; DE GROOTE, M. C. R.¹; REBOREDO, E. H.¹

amanda.camara@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No estudo de grandes mudanças conformacionais em proteínas, os reguladores transcricionais são bons exemplos. Primeiro por serem majoritariamente homodímeros, situação em que sua simetria estrutural simples facilita a análise de mudanças conformacionais também simétricas. Segundo por serem eles mesmos regulados alostericamente, de forma a passarem por mudanças de grande amplitude para se ligarem ao DNA. Reguladores transcricionais formam um grupo muito homogêneo estruturalmente. Para se ligarem ao DNA, a maioria possui um domínio *helix-turn-helix* (HTH) bastante conservado, cuja estrutura já está bem descrita. (1) No entanto, cada regulador é capaz de se ligar especificamente a determinados sítios do DNA, servindo ao seu propósito de regular a expressão de proteínas específicas. Por isso, procuramos estudar não só a flexibilidade conformacional desses reguladores (simulando dinâmicas moleculares - para entender que mudanças são necessárias à ligação do DNA); como também as características estruturais existentes para que esta ligação seja específica. Em particular, aqui discutiremos este último tópico: influências estruturais na ligação entre regulador e DNA. A principal característica estrutural dos reguladores transcricionais é a simetria por serem homodímeros. Por possuírem duas cadeias idênticas de aminoácidos, cada uma com o mesmo domínio de ligação ao DNA, a sequência de bases genéticas também deve preservar uma simetria, de forma que a dupla fita seja quase inteiramente palindrômica (sequências quase idênticas nas fitas principal e complementar). (2) Procurando por mais características desta interação regulador-DNA, fizemos um levantamento das 59 estruturas de reguladores ligados a DNA depositadas no PDB. Caracterizamos, então, detalhadamente, os sítios de ligação de cada estrutura proteica, e seus respectivos trechos de DNA ligado. Com análises estatísticas pudemos identificar grupos cujas diferenças estruturais influenciam na sequência de nucleotídeos a que se ligam. Por exemplo, alguns reguladores transcricionais possuem no seu domínio de ligação um beta-hairpin, (3) além do HTH, que aumenta a área de contato com o DNA, prolongando a sequência de bases. Outra característica de reguladores transcricionais é a interação do HTH com o sulco maior do DNA, fazendo interações específicas com as bases deste (não somente com o açúcar ou o fosfato). Portanto, as bases e os resíduos envolvidos nesta interação são bastante conservados e fundamentais na simetria imposta pela estrutura homodimérica dos reguladores transcricionais. Assim, dois sulcos maiores vizinhos no DNA devem ser simétricos, enquanto que o sulco menor entre eles é o centro da simetria e não possui necessariamente bases conservadas. Como fruto destas análises, propomos que sequências quase palindrômicas de DNA, com tamanho limitado, sejam prováveis sítios de ligação de reguladores transcricionais. Com isso, escrevemos um algoritmo que busca identificar tais sequências dado um genoma completo ou trecho dele. Como essas sequências palindrômicas não são exclusivamente sítios de ligação de reguladores, também procuramos por sítios de ligação de ribossomo próximos a essas sequências, o que confirma tratar-se de uma região reguladora de transcrição. Com esta ferramenta, identificamos no genoma de *E. faecalis* 1200 possíveis sítios de ligação de reguladores transcricionais. Isso indica um caminho para compreender as intrincadas redes de regulação metabólica celular.

Palavras-chave: Regulador transcricional. Sítios de ligação no DNA. Sequências palindrômicas.

Referências:

- 1 ARAVIND, L. et al. The many faces of the helix-turn-helix domain: transcriptional regulation and beyond. **FEMS Microbiology Reviews**, v. 29, p. 231-262, 2005. doi:10.1016/j.femsre.2004.12.008.
- 2 ALBERTS, B. et al. DNA-binding motifs in gene regulatory proteins. In:—————**Molecular biology of the cell**. 4th ed. New York: Garland Science, 2002.
- 3 GAJIWALA, K. S.; BURLEY, S. K. . Winged helix proteins. **Current Opinion in Structural Biology**, v. 10, n. 1, p. 110-116, 2000.

PG39

Photodynamic therapy associated with phototherapy for the treatment of photoaged mice skin

CAMPOS, C. P.¹; JORGE, A. E. S.¹; KURACHI, C.¹

carolinapancampos@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Chronic exposure to ultraviolet radiation (UVR) induces negative skin conditions such as photoaging and photocarcinogenesis. The high levels of UVR reaching the Earth surface combined with the lack of people awareness contribute to the increasing incidence of premature aging and hence the need for efficient rejuvenation treatments. (1) Photodynamic Therapy (PDT) is a noninvasive technique used in the treatment of various skin disorders. Recently, it has been used for cosmetic purposes to treat the photoaged skin, reversing this condition with minimal side effects. (2) There are many studies in the literature concerning PDT for photoaging, however there is still a lack of histological understanding of the processes of this tissue response and healing. The purpose of this study is to combine PDT with phototherapy to treat the photoaged skin of hairless mice and assess the outcome by fluorescence lifetime and fluorescence spectroscopy and mainly by histopathology. Photodamaged skin is induced by irradiating the mice dorsal with a fluorescent lamp emitting in the UVB range (290 - 315 nm, Philips TL 40W/12 RS). The PDT is performed with a 20% 5-aminolevulinic acid (ALA) topical cream and a light emitting diode (LED) device with wavelength centered at 408 nm, delivering a total fluence of 5.0 J.cm^{-2} in single and two-session illumination schemes. After PDT, the photomodulation will be carried out by another LED device (590 nm) which will deliver a fluence of 0.1 J.cm^{-2} , aiming fibroblast activation and synthesis of new collagen fibers. (3) Currently, skin samples of three out of fourteen groups have been prepared for histological analyses and the procedure of other four groups are in progress. The photoaging process was monitored by spectroscopy. The fluorescence spectrum showed emission bands with different intensities for normal and photodamaged skin, suggesting a tissue change which will be validated by histology. The fluorescence lifetime data did not show a pattern that could be associated with the photoaging process; nevertheless, more experiments will be done to confirm this outcome. Fluorescence lifetime data from intrinsically aged skin treated with fractionated illumination PDT presented some variations between before PDT skin and two-week after PDT. It suggests that PDT induced a temporary damage, which is expected, but a four-week follow up is needed. Without the histological assessment of at least half of the groups, the results concerning the treatment protocol are still inconclusive. However, it is expected that the combination of two-fold illumination PDT and photomodulation shows more effectiveness in the skin recovery process.

Keywords: Photodynamic therapy. Photomodulation. Photoaging.

Referências:

1 JUZENIENE, A. et al . Solar radiation and human health. **Reports on Progress in Physics**, v. 74, n. 6, p. 66701-66757, 2011.

2 GOLDBERG, D. J. Photodynamic therapy in skin rejuvenation . **Clinics in Dermatology**, v. 26, n. 6, p. 608-613, 2008.

3 WEISS, R. A. et al . Clinical trial of a novel non-thermal LED array for reversal of photoaging:clinical, histologic, and surface profilometric results . **Lasers in Surgery and Medicine**, v. 36, n. 2, p. 85-91, 2005.

PG40

Magnetic field effects and nodal ground states in InP nanowires

CAMPOS, T.¹; FARIA JUNIOR, P. E.²; SIPAHI, G. M.¹; ZUTIC, I.³

tiagocampo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP/ University at Buffalo

³University at Buffalo

Semiconductor nanowires have attracted great interest in the last decade because of their unique optical, electronic, and spin-dependent properties. They also are among the leading candidates to observe exotic states, such as the Majorana Fermions. In a seemingly trivial situation of a single particle confined in a quantum dot, it was predicted that the valence band ground state with a node is possible and was attributed to the formation of orbital textures. (1) This peculiar behavior, may also be present in wurtzite InP nanowires with diameter less than 10 nm. (2) We have systematically explored the possibility for observing such nodal ground state in various nanowires. The presence of this state modifies the basic optical properties of the nanowire, such as the degree of linear polarization. Here we study the change in these states when an external magnetic field is applied along nanowire axis. We compare the degrees of spin polarization in wurtzite [0001] and zincblende [111] InP nanowires calculated within a k.p method formulation that describes both crystal phases in a single Hamiltonian (3) and accounts for the applied magnetic field.

Palavras-chave: Indium phosphide. Magnetic field. Nodal states.

Referências:

1 LEE, J.; VYBORNÝ, K.; HAN, J. E.; ZUTIC, I. Nodal ground states and orbital textures in semiconductor quantum dots. **Physical Review B**, v. 89, n. 4, p. 045315-1-045315-17, 2014.

2 MOLI-SÁNCHEZ, A.; GARCÍA-CRISTÓBAL, A. Anisotropic optical response of GaN and AlN nanowires. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 24, n. 29, p. 295301-1-295301-10, 2012.

3 FARIA JUNIOR, P. E.; SIPAHI, G. M. Band structure calculations of InP wurtzite/zinc-blende quantum wells. **Journal of Applied Physics**, v. 112, n. 10, p. 103716-1-103716-10, 2012.

PG41

Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda

CANDIDO, D. R.¹; EGUES, J. C.¹

denisricardocandido@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Em sistemas com acoplamento spin-órbita (SO) é possível manipular eletricamente o spin do elétron via a aplicação de um campo elétrico.(1) Isso permite a potencial aplicação do grau de liberdade de spin (Spintronica) no desenvolvimento de novos dispositivos e tecnologias, como por exemplo na tecnologia da informação (computação quântica).(2-3) No entanto, sabe-se que a interação SO causa efeitos indesejáveis, como por exemplo a relaxação e o defasamento de spin. Dessa maneira, do ponto de vista de aplicações, torna-se desejável maximizar o tempo de vida do spin. Neste trabalho, investigamos a relaxação de spin dos elétrons de condução em poços quânticos com duas sub-bandas5 crescidas ao longo das direções [001] e [110] via o mecanismo de D'yakonov-Perel'. Combinando teoria de grupos, o método k.p, a aproximação da função envelope e teoria de perturbação de Löwdin obtemos um Hamiltoniano efetivo para os elétrons da banda de condução na presença das interações SO de Rashba e Dresselhaus. Aqui, diferentemente de alguns trabalhos anteriores, além de incluir o termo cúbico de Dresselhaus, também levamos em conta as contribuições devido à influência da segunda sub-banda de mais baixa energia do poço. A partir deste Hamiltoniano derivamos expressões para os tempos de relaxação do spin e analisamos como estas novas contribuições (termos do acoplamento com a segunda sub-banda) afetam os tempos de vida dos spins. Comparamos os tempos de relaxação para as direções [001] com os calculados para a direção [110]. Nossos resultados mostram que as contribuições devido à segunda sub-banda são desprezíveis para ambas as direções. Mostramos também que o tempo de relaxação para a direção [110] é mais longo que o da [001], resultado consistente com experimentos (3) e outros trabalhos teóricos anteriores.

Palavras-chave: D'yakonov-Perel'. Relaxação de spin. Spintronica.

Referências:

1 DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. . **Applied Physics Letters**, v.56, p.665, 1990.<http://dx.doi.org/10.1063/1.102730>.

2 LOSS, D.; DiVINCENZO, D. P.. Quantum computation with quantum dots. . **Physical Review A**, v.57, p.120,1998. doi:10.1103/PhysRevA.57.120.

3 OHNO, Y. et al. . Spin relaxation in GaAs (110) quantum wells. . **Physical Review Letters**, v. 83, n. 20, p.4196, 1999.

PG42

Construction of a global map of protein-protein interactions in c-di-GMP signalling pathways of *Pseudomonas aeruginosa*

CARDOSO, A. R.¹; NAVARRO, M. V. A. S.¹; CAMILO, C. M.¹

andrea.cardoso@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The process that leads to the development of biofilm-related traits in bacteria is conducted by a series of mechanisms involving the small signaling molecule c-di-GMP and the associated enzymes that participate in its synthesis and degradation, as well as effector molecules, which are allosterically regulated by this second-messenger. Generally, low levels of this molecule are reported to promote the expression of phenotypes associated with a planktonic lifestyle, whilst high intracellular levels of this messenger are reported to promote the expression of features associated with a sessile lifestyle, in which biofilms are formed. These structures are predominant in chronic infections due to a consequent increase in bacterial resistance to antibiotics, creating an obstacle to conventional treatments. (1) Over the last few years, direct protein-protein interaction between members of the c-di-GMP signaling pathways has emerged as a probable key element in the regulation and signal specificity of this complex and still unclear control system. For instance, a recently published study shows how two active diguanylate cyclases (synthesis of c-di-GMP) from the GGDEF family engage in the positive regulation of motility in *X.campestris* by interacting with a two-component regulator phosphodiesterase (degradation of c-di-GMP) from the HD-GYP family and a PilZ effector protein. (2) Therefore, the present study proposes a global investigation of the probable network of interactions between proteins containing the diguanylate cyclase GGDEF domain, the phosphodiesterase EAL and HD-GYP domains and the effector PilZ domain in *P. aeruginosa*, using the bacterial two-hybrid system, which allows the identification of interaction partners by the activation of reporter genes. (3) For this purpose, two libraries of recombinant DNA for both bait and target vectors (a total of 90 sequences) were constructed using the *Ligase Independent Cloning* method, in collaboration with researcher César Moisés Camilo, from the Molecular Biotechnology Group (IFSC). To verify and validate the sequences of recombinant DNA obtained, sequencing was performed. In addition, standardization tests were also performed to ensure the quality and consistency of the two-hybrid interaction assays. Numerous two-hybrid interaction tests have been carried out and some possible interaction partners were found, including a partnership similar to that reported by Ryan and collaborators. (2) It is a prospect of this study to further investigate these interactions using biophysical methods in order to achieve a more comprehensive overview of the mechanisms underlying regulation of this intricate control system.

Palavras-chave: c-di-GMP. Protein-protein interaction. Bacterial biofilms.

Referências:

1 RÖMLING, U.; GALPERIN, M. Y.; GOMELSKY, M. Cyclic di-GMP: the first 25 years of a universal bacterial second messenger. **Microbiology and Molecular Biology Review**, v. 77, n. 1, p. 1-52,

2013.

2 RYAN, R. P. et al. Dynamic complex formation between HD-GYP, GGDEF and PilZ domain proteins regulates motility in *Xanthomonas campestris*. **Molecular Microbiology**, v. 86, n. 3, p. 557-567, 2012.

3 JOUNG, J. K.; RAMM, E. I.; PABO, C. O. A bacterial two-hybrid selection system for studying protein-DNA and protein-protein interactions. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 97, n. 13, p. 7382-7387, 2000.

PG43

Estudo do modelo estocástico PARPM

CARVAJAL JARA, D. A.¹; ALCARAZ, F. C.¹

dacj1984@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Em fenômenos críticos gerais, certos tipos de quantidades são independentes dos detalhes dos sistema como poderia ser o espaçamento da rede e são classificados em distintas classes de universalidade de comportamento crítico. Estas classes de universalidade são descritas por quantidades universais que dependem de quantidades como as simetrias, a dimensão do parâmetro de ordem e a dimensão do sistema. Com o desenvolvimento da Teoria de Invariância conforme (CFT), mostrou-se que modelos críticos que apresentam invariância de dilatação, rotação e translação são também invariantes conformes e os mesmos são classificados em classes específicas de universalidade. Desta forma dois modelos com a mesma classe de universalidade por muito diferentes que sejam suas dinâmicas ou suas redes a curtas distâncias e tempos, elas terminam apresentando comportamento termodinâmicos a longa distância (ou tempo) semelhantes. O Escopo dos sistemas críticos e da universalidade compreende também modelos estocásticos em não equilíbrio e sistemas dinâmicos complexos. Recentemente a teoria de criticalidade auto-organizada (SOC) tem sido aplicada para estudar diversos sistemas como terremotos, dinâmica neural, redes elétricas, explosões solares, fusão nuclear, incêndios florestais, colisões de trânsito, tempestades magnetosféricas, avalanches de neve, e crescimento de superfícies entre outros.(1) Contudo, diferentemente dos casos críticos de equilíbrio não se sabe ainda quais seriam os ingredientes fundamentais que garantiriam em fenômenos críticos de não equilíbrio a invariância conforme. Procurando encontrar tais ingredientes fundamentais em modelos estocásticos de não equilíbrio, estudaremos o modelo estocástico PARPM recentemente desenvolvido (2) que apresenta fases massivas, criticalidade, invariância conforme e estados auto-organizados. Este modelo estocástico foi o primeiro modelo a apresentar invariância conforme, isto é, as funções de correlação espaciais e temporais são relacionadas. Este modelo possui alguns ingredientes considerados importantes na dinâmica dos modelos SOC, tais como avalanches e estados absorventes(3), além disso tem sido mostrado que com a mudança de um dos parâmetros dos modelo podemos ter quebra da invariância conforme. O estudo apresentado até o momento (2) para o modelo PARPM foi feito para a situação em que as taxas de absorção U_a e de desorção U_b nos processos do modelo são iguais, isto é, $U = U_a/U_b = 1$. Atualmente estudamos o modelo no caso geral em que $U \neq 1$. A ideia é determinar o diagrama de fases do modelo no espaço de parâmetros (p, U) . Resultados preliminares apresentam dinâmicas críticas com escalonamento anômalo ($U < 1$), regiões massivas com dinâmicas não massivas ($U = 0$), e regiões metaestáveis para uma extensão do modelo PARPM ($P > 2$).

Palavras-chave: Criticalidade auto-organizada SOC. Teoria de campos conforme. Transições de fase em estados absorventes. .

Referências:

- 1 ASCHWANDEN, M. J. **Theoretical models of self-organized criticality (SOC) systems**. Disponível em:<arXivpreprintarXiv:204.5119,2012>. Acesso em: 19 ago. 2014..
- 2 ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. . A conformal invariant growth model. **Journal of Statistical Mechanics**, v.12, p.12032, 2010.doi:10.1088/1742-5468/2010/12/P12032.
- 3 ALCARAZ, F.C.; RITTENBERG, V. From conformal invariance to quasistationary states. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2011, p.09030, 2011.doi:10.1088/1742-5468/2011/09/P09030.

PG44

Avaliação do potencial de sequestro e emissão de carbono no solo nos manejos e tratamento de cana-de-açúcar

CARVALHO, C. M.¹; MILORI, D. M. B. P.²; MOUNIER, S.³; GARNIER, C.³; LA SCALA JUNIOR, N.⁴; FIGUEIREDO, E. B.⁴; CORÁ, E.⁴

camilamc.mila@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação - CNPDIA

³Université de Toulon - La Garde

⁴Departamento de Ciências Exatas - UNESP Jaboticabal

Vários estudos tem concluído que a conversão de florestas, savanas e pradarias em solos cultiváveis ou de pastagem tem diminuído o conteúdo da matéria orgânica do solo (MOS) em solos de regiões tropicais e subtropicais. (1) O impacto do manejo agrícola para a MOS está relacionado à emissão de gases do efeito estufa (GEE), sendo as práticas agrícolas e mudanças no uso da terra responsáveis por 40,9% da emissão dos GEE. (2) Com a crescente demanda alimentar, por fármacos, fibras e energia, segundo o relatório das Organizações das Nações Unidas de 2013 a população mundial aumentará em 1 bilhão em 12 anos e 33% em 2050, temos como principal desafio manter o desenvolvimento do mundo com sustentabilidade. Composto um dos principais sistemas agroindustriais do Brasil e do mundo, a cadeia produtiva da cana-de-açúcar vem se adaptando a uma produção sem queima, e busca formas alternativas de gestão dos resíduos que sejam sustentáveis. No manejo da cana, há duas práticas mais comuns: manejo tradicional, que envolve a queima da cana, visando facilitar a sua colheita manual, a cana queimada (CQ) e a colheita mecanizada, ou cana crua (CC), com incorporação da palhada no solo. Recentemente as cinzas, um subproduto da queima do bagaço de cana na geração de energia, tem sido usada como aditivo agrícola visando tratamento do solo. O objetivo deste trabalho é observar o efeito da adição de resíduos as propriedades físicas e químicas do solo para a fixação de carbono e avaliar os sistemas quanto a degradação da MOS. Neste estudo avaliamos o ácido húmico do solo, uma importante fração do solo relacionado a qualidade do solo, através de medidas de Carbono Orgânico Total, Espectroscopia de Fluorescência 3D e Quenching de Fluorescência, utilizando o PARAFAC, Parallel Factor Analysis, para tratamento de dados. Também medimos a fluorescência induzida por laser (FIL) do solo inteiro com o objetivo de comparar os resultados de humificação fornecidos pelas técnicas. A FIL aplicada a solos é uma nova metodologia proposta por (3) que tem se mostrado eficiente para avaliar o grau de humificação da MO de solos sem tratamento químico prévio. A maioria das técnicas usuais de análise exigem a extração e fracionamento químico das substâncias húmicas (SH) do solo, tornando a análise de solos um processo trabalhoso. Além disso, os produtos deste tratamento (ácido húmico, ácido fúlvico e humina) podem sofrer modificações em relação a sua forma in situ. Como resultado observamos diferença entre manejos de CC e CQ com relação a constante de equilíbrio de complexação, e a adição de cinzas no solo parece produzir uma diminuição na humificação do solo. Quanto a humificação por FIL confirmamos os

resultados vistos na técnica de Espectroscopia de Fluorescência 3D, e para o tratamento de Cinzas as técnicas como um todo apresentam um mesmo comportamento. A FIL mostra forte correlação com o índice humificação do AH obtido por espectroscopia de fluorescência 3D para os manejos de CC e CQ e forte correlação com as técnicas que mediram o AH na cinza.

Palavras-chave: Espectroscopia. Materia orgânica. Solo.

Referências:

- 1 DIECKOW, B. et al. Land use, tillage, texture and organic matter stock and composition in tropical and subtropical Brazilian soils. **European Journal of Soil Science**, v. 60, n. 2, p. 240-249,2009.
- 2 RENEWABLE energy sources and climate change mitigation:IPCC special report. . Disponível em:<http://www.ipcc.ch/pdf/special-reports/srren/SRREN_Full_Report.pdf>. Acesso em:19 ago. 2014.
- 3 MILORI, D.M.B.P. et al. Organic matter study of whole soil samples using laser-induced fluorescence spectroscopy. **Soil Science Society of America Journal**, v.70, n.1, p. 57-63,2006.

PG45

Quantum turbulence in a two-species Bose-Einstein condensate ^{23}Na - ^{41}K with tunable interactions

CASTILHO, P. C. M.¹; PEDROZO-PENAFIEL, E.¹; VIVANCO, F. J.¹; FARIAS, K. M.¹; ROATI, G.²; BAGNATO, V. S.¹

patricia.cmcastilho@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²LENS

The study of the quantum turbulence phenomena in atomic Bose-Einstein Condensates was initiated by our group with Rubidium-87 atoms. Besides the standard characteristic of tangled vórtices, we also observed two new features of the quantum turbulent atomic clouds: the self-similar expansion (1) and the Kolmogorov decay law for its energy spectrum. (2) In this Phd Project we propose the construction of a new experimental apparatus to produce a two-species Bose-Einstein condensate, ^{23}Na and ^{41}K , with tunable interactions, as well as the mechanism to generate vórtices. The first studies involving their nucleation, their transfer between the different species and the dynamics of quantum turbulence in a mixed BEC will also be explored. The first steps in the way of achieving the BEC and the possibility in changing the inter-species atomic interaction via Feshbach resonances are detailed on this work as well as the details of the actual stage of the experimental setup.

Keywords: Bose-Einstein condensation. Feshbach resonances. Quantum turbulence.

Referências:

1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301, 2009.

2 THOMPSON, K. J.; BAGNATO, G. G.; TELLES, G. D.; CARACANHAS, M. A.; SANTOS, F. E. A.; BAGNATO, V. S. Evidence of power law behavior in the momentum distribution of a turbulent trapped Bose-Einstein condensate. **Laser Physics Letters**, v. 11, n. 1, p.015501, 2014.

PG46

Septina 4 : estrutura de possíveis complexos com outras septinas e interações

CAVALCANTE, N.¹; GARRATT, R. C.¹

nayarabio@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - IFSC

Septinas constituem uma família de proteínas ligantes de GTP presentes em metazoários originalmente identificadas em mutantes de leveduras. (1) São proteínas que apresentam diferentes papéis que se assemelham a elementos de citoesqueleto. Em humanos há 13 genes parálogos, os quais desempenham seu papel dentro da células pela formação de heterofilamentos. Meu projeto de doutorado objetiva determinar em quais complexos a SEPTINA 4 (SEPT4) está presente e quais suas relações funcionais. Clonamos as diferentes combinações dos genes das septinas parceiras a SEPT4 em vetores bicistrônicos. As septinas parceiras foram indicadas pelo ensaio de duplo-híbrido prévio (2) e dados da literatura. Elas são a SEPT8, 10, 11 e 14. A dupla SEPT4/8 está no pRFSDuet foi expressa e purificada por cromatografia de afinidade e exclusão de tamanho. O complexo SEP4/5/8 também foi purificado em protocolo similar. Estudos estão sendo realizados para a determinação do estado oligomérico de tal complexo por ultracentrifugação analítica, espalhamento de luz, gel nativo e microscopia eletrônica. A clonagem das duplas SEPT4/10 e SEPT4/11 estão em curso. A clonagem da dupla SEPT4/14 (3) foi bem sucedida e já estão sendo realizados testes expressão. Pretendemos adicionar a SEPT9 também e estudar o comportamento oligomérico deste complexo .

Palavras-chave: Septina. Filamentos. Co-expressão.

Referências:

- 1 HARTWELL, L. H. . Genetic control of the cell division cycle in yeast: IV. genes controlling bud emergence and cytokinesis. **Experimental Cell Research**, v. 69, n. 2, p. 265-276, 1971.
- 2 NAKAHIRA, M. et al . A draft of the human septin interactome. **PloS One**, v. 5, n. 11, p. e13799, 2010.
- 3 SHINODA, T. et al. Septin 14 Is involved in cortical neuronal migration via interaction with Septin 4. **Molecular Biology of the Cell**, v. 21, n. 8, p.1324-1334, 2010.

PG47

An insight into design and safety of carbon nanotube and poly (amidoamine) nanocomposites through molecular dynamics simulations and flow cytometry

CENTURION, L. M. P. C.¹; LELIMOUSIN, M.²; BERNARDI, J. C.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

lilian@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²University of Oxford

One of the most promising fields of nanoscience is the possibility of creating new materials from building blocks that present desirable properties, leading to an unprecedented compound, with convergence of interesting characteristics. Recent literature has reported the fabrication of carbon nanotubes (CNTs) and poly(amidoamine) (PAMAM) nanocomposites and has suggested their use in biosensors and drug and gene delivery applications. (1-2) However, very little is known about the interaction of these two nanomaterials and the self-assembly process that results in the composite. In this study, we used coarse-grained molecular dynamics to perform a comprehensive investigation into the molecular details of carboxylated CNT/PAMAM nanocomposite formation. We observed that the binding mechanism encompasses three distinct events: the wrapping and the rotation of the poly(amidoamine) around the carbon nanotube and the translation of the polymer towards more hydrophobic regions of the nanotubes, away from the carboxyl groups in their tips. This is a strong evidence that what rules the formation of the composite and keeps its structure is a non-polar interaction between the inner layers of PAMAM and the nanotube walls, instead of electrostatic attraction between charged groups of the constituents. We also carried out flow cytometry experiments with FC3H cells incubated with nanocomposites prepared with three PAMAM generations: 2, 4 and 6. This assay revealed that for this cell lineage the percentage of viable cells after incubation with the nanocomposites is similar to the one registered for the isolated nanomaterials, showing that nanotoxicity is an issue to be taken into account when designing drug and gene delivery applications based on this hybrid material. It was also found that the predominant cell death process was apoptosis for the three generations studied. Such results may contribute to improve the design and safety of applications containing this nanoparticle.

Keywords: Nanomedicine. Carbon nanotubes . Dendrimers.

Referências:

1 PAN, B.; CUI, D.; XU, P.; OZKAN, C.; FENG, G.; OZKAN, M.; HUANG, T.; CHU, B.; LI, Q.; HE, R.; HU, G. Synthesis and characterization of polyamidoamine dendrimer-coated multi-walled carbon nanotubes and their application in gene delivery systems. **Nanotechnology**, v. 20, n. 12, p. 125101, 2009.

2 WEN, S.; LIU, H.; CAI, H.; SHEN, M.; SHI, X. Targeted and pH-responsive delivery of doxorubicin



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

to cancer cells using multifunctional dendrimer-modified multi-walled carbon nanotubes. **Advanced Healthcare Materials**, v. 2, n. 9, p. 1267-1276, 2013.

PG48

Thermodynamic properties of transition metal nanoclusters

CEZAR, H. M.¹; RONDINA, G. G.¹; SILVA, J. L. F.²

henrique.musseli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Transition-metal (TM) nanoclusters have drawn great attention in the last years due to the possibility to tune their properties as function of composition, size and shape. However, experimental techniques face limitations to access their properties, in particular, thermodynamic properties phase changes. To understand the thermodynamic properties of Co, Ni, Pt nanoclusters and their alloys, we employ our own implementation of the Parallel Tempering Monte Carlo (PTMC) (1) algorithm within the Gupta many-body empirical potential. An analysis of the heat capacity of the TM nanoclusters aided by the modified euclidean metric described in (2) enabled us to identify the phase changes that happen at each temperature, and characterize them based on this information. Mainly we observe a single characteristic phase change, related with a the potential energy surface (PES) with one single funnel, which takes place as a nanocluster melts. However, depending on the material, the PES may contain more than one stable minimum separated by a small energy difference, in particular for Pt, which leads to solid-solid phase changes. We found that the solid-solid phase transition disappear by alloying Pt with Co or Ni, even with a small number of atoms. This fact is related to the changes in the PES, that in the investigated nanoalloys, is simplified to just one large funnel. We conclude that combining PTMC with techniques such as the similarity with euclidean metrics, can give useful insights over the phase changes in TM nanoclusters.

Keywords: Parallel tempering Monte Carlo. Nanoclusters. Thermodynamic properties.

Referências:

1 HUKUSHIMA, K.; NEMOTO, K. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 65, n. 6, p. 1604-1608, 1996.

2 GEHRKE, R.; REUTER, K. Assessing the efficiency of first-principles basin-hopping sampling. **Physical Review B**, v. 79, n. 8, p. 085412-1-085412-10, 2009.

PG49

Adsorption of CO, NO and OH on transition-metal 13-atom clusters: a density functional theory investigation

CHAVES, A. S.¹; SOBRINHO, D. G.²; SILVA, J. L. F.²

aschaves@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Small transition-metal (TM) binary clusters have great potential as catalysts (1) due to the sinergetic effects that might arise from the combination of two metals. For example, Pt-based binary clusters have better catalytic performance than pure Pt clusters for Oxigen Reduction Reactions (ORR) for fuel-cell applications. (2) However, a deep understanding of the activity enhancement is far from satisfactory. In this work, we applied extensive density functional theory (DFT) calculations within the generalized gradient approximation (GGA) in the formulation proposed by Perdew-Burke-Ernzerhoff (PBE) as implemented in the FHI-aims package (3), to obtain an in-depth understanding of the adsorption of CO, NO and OH on Pt₁₃, Pt₇Cu₆, and Cu₁₃ clusters in the cationic, neutral, and anionic charge states. Based on the Blyholder model, we found similarities between the CO and NO interactions, where the main differences arise due to the additional electron on the NO antibonding orbital. Decreasing the cluster charge state also decreases the adsorption energy because the back-donation is reduced while the bond lengths of the adsorbed CO and NO are overall increased with the charge state related with their enhanced antibonding population. We observed an enhanced CO and NO adsorption strength on the binary clusters compared with pure Pt clusters. This result is counterintuitive once Cu is less reactive than Pt. It is attributed to the narrowing of the d-states while they approach closer to the Fermi energy due to the presence of the Cu atoms. In fact, this strengthening is very dependent on a specific Cu concentration around the Pt site and, in turn, it is not observed for OH adsorption, which is mainly driven by the electrostatic interactions. Thus, electronic and structural changes upon the adsorption observed for the lowest energy configurations leads into the optimization of the symmetry and the energetic position of the frontier orbitals as well as the reduction in the Pauli repulsion for the OH interaction maximizing the adsorption energies. This study forms a basis to further investigations of adsorption process on supported or ligand clusters.

Keywords: Molecular adsorption. Transition-metal clusters. Density functional theory.

Referências:

- 1 LU, Y.; CHEN, W. Sub-nanometre sized metal clusters: from synthetic challenges to the unique property discoveries. **Chemical Society Reviews**, v. 41, n. 9, p. 3594-3623, 2012.
- 2 STRASSER, P. et al. Lattice-strain control of the activity in dealloyed core-shell fuel cell catalysts. **Nature Chemistry**, v. 2, n. 6, p. 454-460, 2010.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 BLUM, V. et al. Ab initio molecular simulations with numeric atom-centered orbitals. **Computer Physics Communications**, v. 180, n. 11, p. 2175-2196, 2009.

PG50

Quantum phase transition in a 2D vortex lattice

CHAVIGURI, J. R. H.¹; CARACANHAS, M. A.¹; BAGNATO, V. S.¹

rchaviguri@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Two-component condensate systems have an enormous impact in the field of ultracold atoms, in special after the experimental production of Bose-Einstein condensate (BEC) of fermions. The latter consists of effective bosonic molecules, tightly bound Cooper pairs, formed after the fermions be combined by cooling with bosonic atoms. The experimental observation of the BEC-BCS transition with this molecular BEC made the ultracold atoms a powerful tool to test condensate matter models, which can be studied in a highly controllable environment. The two-species BEC of atomic bosons also has rich and new physics to be explored. There are important experiments in this field, including that of Cornell's group, with different ⁸⁷Rb hyperfine states (1), where the static properties of binary mixtures, their relative phase coherence and dynamics were investigated. The same group was able to nucleate vortex with this system, and more recently, to produce the superposition of two array of vortices. The possibility of tuning the scattering length is also a fundamental tool in the two-component BEC scenario. In the experiment of Inguscio's group (2), they use different atomic species, more specifically the ⁸⁷Rb and ⁴¹K, to produce a two-component BEC via sympathetic cooling technique. In spite of the different traps seen by each species (different masses involved), even a small superposition of the BEC clouds brings observable effects of their interaction. Important results obtained by this group rely on the high control of the intra and inter-species scattering lengths via Feshbach resonance technique. Based on these experiments and related theory, we will consider in this project a mixture of two superfluids and explore the possibility of trapping one very dilute superfluid species in the vortex core of the second species, with much higher density. Basically we have an array of vortices in a BEC that overlaps with another interacting superfluid component. We will study the properties of the resulting lattice system through the Bose-Hubbard model, proposing an experiment to characterize the quantum phase transition of the trapped species by scattering length tuning. A particularity of our lattice will be the presence of its own dynamics giving by the Tkachenko low-energy modes. (3) The effects of the lattice dynamics over the dilute species will be explored via a polaronic transformation of the impurity's Hamiltonian hopping parameters.

Keywords: Bose-Einstein condensate. Bose-Hubbard. Phase-transition.

Referências:

- 1 MATTHEWS, M. R. et al. Watching a superfluid untwist itself: recurrence of rabi oscillation in a Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 17, p. 3358-3361, 1999.
- 2 MODUGNO, G. et al. Two atomic species superfluid. **Physical Review Letters**, v. 89, n. 19, 190404-1-190404-4, 2002.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 BAYM, G. Tkachenko modes of Vortex Lattices in Rapidly Rotating Bose-Einstein Condensates. **Physical Review Letters**, v. 91, n. 11, p. 110402-1-110402-4, 2003.

PG51

Tunelamento macroscópico de carga

CHERUBIM, C.¹; BRITO, F.¹

cfcherubim@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O tunelamento quântico se caracteriza pelo fato de uma partícula conseguir transpassar uma barreira de potencial mesmo sem energia para tal. Este tunelamento pode se dar entre suas regiões vizinhas, sendo este o tunelamento usual ou de primeira ordem, ou entre regiões afastadas, separadas por uma ou mais regiões intermediárias que não são ocupadas durante o processo de tunelamento, conhecido como cotunelamento elástico (1-3) ou tunelamento de ordem superior. Este trabalho tem por principal objetivo identificar as condições necessárias e mensurar o cotunelamento quântico na evolução temporal de um pacote de onda gaussiano para alguns sistemas de barreiras. Como metas secundárias aproveitaremos o mesmo sistema como simulação de decaimento de um estado meta-estável (similar ao processo de decaimentos radioativos) e como um possível filtro de partículas. Para se obter a evolução temporal de um pacote de onda em um sistema de barreiras usamos simulações que resolvem a equação de Schrödinger através do método de diferenças finitas. Com relação aos objetivos secundários obtemos um ambiente de simulação da evolução temporal do decaimento radioativo e um filtro de partículas capaz de selecioná-las em um domínio de energia específico de acordo com a geometria do sistema de barreiras. Por fim, buscamos a confirmação ou não da existência de tunelamento não-local em vários cenários de potenciais.

Palavras-chave: Cotunelamento elástico. Tunelamento não-local. Estados meta-estáveis.

Referências:

- 1 LAFARGE, P.; ESTEVE, D. Nondivergent calculation of unwanted high-order tunneling rates in single-electron devices. **Physical Review B**, v. 48, n. 19, p. 14309-14318, 1993.
- 2 NETO, G. D. M.; DE PONTE, M. A.; MOUSSA, M. H. Y. Nonlocal dissipative tunneling for high-fidelity quantum-state transfer between distant parties. **Physical Review A**, v. 85, n. 5, p. 052303-1-052303-5, 2012.
- 3 SAU, J. D.; SWINGLE, B; TEWARI, S. **A proposal to probe quantum non-locality of Majorana fermions in tunneling experiments**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1210.5514>>. Acesso em: 19 ago. 2014.

PG52

Spontaneous generation of quantum turbulence through the decay of a giant vortex in a two-dimensional superfluid

CIDRIM, A.¹; SANTOS, F. E. A.²; BAGNATO, V. S.¹

andrecidrim@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

We show the possibility of generating two-dimensional quantum turbulence through simulations of a giant vortex decay in a trapped Bose-Einstein condensate. While evaluating the incompressible kinetic energy spectra of the quantum fluid described by the Gross-Pitaevskii equation, a bilinear form in a log-log plot is verified. A characteristic scaling behavior for small momenta shows resemblance to the Kolmogorov $k^{-5/3}$ law, while for large momenta it reassures the universal behavior of the core-size k^{-3} power-law. The evolution of the inertial range of the spectra from Kolmogorov power-law to the k^{-1} shows that the system goes from a briefly turbulent to state to a thermalized state. For the specific time window where cluster dynamics is seen, an indication of a mechanism of energy transportation consistent with an inverse cascade is present. (1) The feasibility of the described physical system with the currently available experimental techniques to create giant vortices opens up a new route to explore quantum turbulence.

Keywords: Atomic physics. Bose-Einstein condensate. Quantum turbulence.

Referências:

1 CIDRIM, A.; BAGNATO, V. S.; SANTOS, F. E. A. **Spontaneous generation of quantum turbulence through the decay of a giant vortex in a two-dimensional superfluid.** . Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1405.0992v1.pdf>>. Acesso em: 26 ago. 2014.

PG53

Remote shimming coil controller over HTTP

COELHO, F. B.¹; DIAS, D. M.¹; PIZETTA, D. C.¹; VIDOTO, E. L. G.¹; MARTINS, M. J.¹; TANNÚS, A.¹

felipe.coelho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The quality of magnetic resonance experiments is highly dependent on the homogeneity of the main magnetic field. (1) For imaging systems, an homogeneity less than 5 parts per million (ppm) is desired, and for spectroscopy, less than 1 ppm. Such homogeneity is hard to achieve with the main magnet only, requiring extra equipment to be able to lower it. Active shimming coils are one possibility, and the one covered by this work. A remote controller built with a Raspberry Pi as a server acts as the interface for the shimming coils. The controller can be placed as close to the equipment as viable, reducing latency during current changes in the shimming coils, as well as being able to closely monitor the coils' health. HTTP is used to allow the controller to be connected to any regular computer network through, for example, shielded Ethernet cables, and be easily accessible by clients such as the ToRM Console. The Raspberry Pi interfaces with 16 bit DACs and ADCs using the SPI protocol, which in turn are connected to amplifiers and the shimming coils. Aside from the regular HTTP interface, the controller will also have a secondary SPI interface to be used directly by the spectrometer. This interface will allow the spectrometer to establish a different set of shimming coil currents per slice in a imaging experiment, resulting in more detailed images in a multi-slice experiment. A prototype has been built using the OrCAD suite (2) to control 8 channels, being able to set the current in each channel and also read it back. Care has been taken in the current design to properly ground the mixed-signal Integrated Circuits (ICs) used in the prototype (3) in order to reduce unwanted voltage offsets. The controller outputs are currently able to generate voltages with less than 0.1% full scale error, and a 0.05% error is targeted in a future design. It is currently able to set the current for a single channel in under 4 μ s and less than 50 μ s for all 8 channels. Reading the coils' currents has not been timed extensively, but it is currently possible to read all 8 channels in under 100 μ s. So far the controller has been able to handle continuous testing during several hours without issues. The output precision is still to be increased in a new board layout, but has been enough to assert that all systems are working tightly together. In the upcoming months, the focus will shift to integration with other software developed by the group, especially the ToRM Console, which will be the main client for the shimming controller.

Keywords: Magnetic resonance. Shimming. HTTP.

Referências:

1 CALLAGHAN, P. T. **Principles of nuclear magnetic resonance microscopy**. Oxford: Clarendon Press, 1993.

2 MITZNER, K. **Complete PCB design using OrCAD capture and PCB editor**. Amsterdam:

Elsevier, 2009.

3 FORTUNATO, M. **Successful PCB grounding with mixed-signal chips:** follow the path of least impedance. San Jose: Maxim Integrated, Oct. 2012. Tutorial 4540. Disponível em: <<http://www.maximintegrated.com/en/app-notes/index.mvp/id/5450>>. Acesso em: 20 ago. 2014.

PG54

Síntese e caracterização de perovskitas $Sr_{1-x}Cu_xTiO_3$ e $SrTi_{1-x}Cu_xO_3$ aplicada a catálise da reação de deslocamento água-gás

COLETTA, V. C.¹; MARCOS, F. C. F.²; NOGUEIRA, F. G. E.²; BERNARDI, M. I. B.¹; ASSAF, E. M.²; MASTELARO, V. R.¹

vitor.coletta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

A reação de deslocamento água-gás é realizada na produção de H₂ livre de CO, necessário em aplicações como o abastecimento de células de combustível do tipo membrana de troca de prótons (PEM). Catalisadores de Cu-ZnO-Al₂O₃, tipicamente utilizados para esta reação, sofrem desativação devido um processo de aglomeração das partículas metálicas. (1) Por outro lado, óxidos de estrutura perovskita contendo cobre são promissores para a catálise deste tipo de reação por apresentar uma boa estabilidade química. (2) Este projeto de tese tem como objetivo realizar a síntese e a caracterização de nanopartículas de composição $Sr_{1-x}Cu_xTiO_3$ e $SrTi_{1-x}Cu_xO_3$ visando sua aplicação como catalisadores para a reação de deslocamento água-gás. A síntese foi realizada através do método dos precursores poliméricos com calcinação em atmosfera de N₂ e O₂, possibilitando a obtenção de nanopartículas de grande área superficial em comparação a outros métodos. (3) Os resultados de difração de raios-X mostraram que os íons de cobre são incorporados no sítio do Sr e do Ti da fase perovskita para uma substituição de até 3%. Experimentos de redução à temperatura programada (TPR) e de espectroscopia de absorção de raios-X na borda de absorção dos átomos de titânio e cobre (XANES) indicaram que o pré-tratamento de ativação, com a redução do cobre, deve ser realizado com 5% H₂/gás inerte a 250°C. Na continuidade do projeto estão previstos testes de atividade catalítica, experimentos de difração de raios-X *in situ* no LNLS e o estudo das mesmas amostras sintetizadas através do método hidrotermal assistido por micro-ondas.

Palavras-chave: Catálise. Perovskitas. Hidrogênio.

Referências:

1 RATNASAMY, C.; WAGNER, J. P. . Water-gas shift catalysis. **Catalysis Reviews: science and engineering**, v. 51, n. 3, p. 325-440, 2009.

2 MALUF, S. S. et al. Study of La_{2-x}CaxCuO₄ perovskites for the low temperature water gas shift reaction. **Applied Catalysis A: general**, v. 413-414, p. 85-93, 2012. doi: dx.doi.org/10.1016/j.apcata.2011.10.047.

3 DA SILVA, L. F. et al. An improved method for preparation of SrTiO₃ nanoparticles. **Materials Chemistry and Physics**, v. 125, n. 1-2, p. 168-173, 2011.

PG55

Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares

COMIN, C. H.¹; COSTA, L. F.¹

chcomin@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Uma das dinâmicas mais estudadas na área de redes complexas é a de passeio aleatório tradicional. (1) Nessa dinâmica o agente possui probabilidade de transição equiprovável de um nó para cada um de seus vizinhos. Provavelmente a propriedade mais conhecida de tal dinâmica é que sua probabilidade estacionária é completamente determinada pelo grau de cada nó da rede. Para redes direcionadas essa propriedade não é mais válida, e pelo fato de ser um problema de difícil tratamento analítico, existem poucos estudos sobre o tema. (2-3) Neste trabalho, em grande parte experimental, atacamos uma versão simplificada do problema, na qual existem comunidades bem definidas na rede. Tais comunidades representam um conjunto de eficiência diferenciada na rede, isto é, nós de uma dada comunidade possuem uma capacidade similar de gerar atividade a partir do grau de entrada de cada nó. Tal propriedade é apenas um exemplo de um conceito mais geral que pode ocorrer em qualquer dinâmica de rede. Esse conceito envolve a discriminação dos nós da rede em diferentes grupos ao considerarmos suas propriedades topológicas e dinâmicas simultaneamente, sendo que essa discriminação não ocorre ao analisarmos a topologia ou dinâmica separadamente.

Palavras-chave: Redes complexas. Passeio aleatório. Redes direcionadas.

Referências:

- 1 LOVÁSZ, L. Random walks on graphs: a survey. **Combinatorics**, v. 2, n. 1, p. 1-46, 1993.
- 2 FORTUNATO, S.; BOGUÑÁ, M.; FLAMMINI, A.; MENCZER, F. Approximating pagerank from in-degree. **Lectures Notes in Computer Science**, v. 4936, p. 59-71, 2008. doi: 10.1007/978-3-540-78808-9_6.
- 3 ZIA, R. K. P.; SCHMITTMANN, B. Probability currents as principal characteristics in the statistical mechanics of non-equilibrium steady states. **Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment**, v. 2007, 2007. doi:10.1088/1742-5468/2007/07/P07012.

PG56

Flexible four channel phased array MRI coil

CONSALTER, D.¹; TANNUS, A.¹; VIDOTO, E.¹; MARTINS, M.¹; PAIVA, F.¹

dmconsalter@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As a way to reduce acquisition time on Magnetic Resonance Imaging (MRI) scanners, parallel techniques and dedicated hardware has been developed since the 1980s(1). A phased array is a device concept of receiver only mode which uses multiple coils (channels) with their own detection circuits to simultaneously acquire MRI or localized spectroscopic signals(2). An example of parallel imaging technique that use phased array coils is Sensitivity Encoding (SENSE)(3). On this work, we are developing a four-channel receiver coil for rat head anatomy to operate on a 2T MRI scanner using flexible PCB as a way to validate the construction method. As a parallel method, we developed a CIERMag proprietary SENSE code to reconstruct the images resulting from the parallel acquisition. The SENSE algorithm was implemented and tested using a two-channel wire coil to acquire and reconstruct images. The four-channel coil is under construction on a work in progress task; preliminary results show a quality factor of only 90 for each channel tuned at 85.2 MHz. Despite of the lower quality factor (Q) comparing to a regular wire winding coil, the signal-to-noise ratio (SNR) is expected to be good enough to compensate for the loss caused by the lower Q as the geometry of the coil is more adequate of the anatomy, and then, has more proximity since the coil is flexible. In addition, the coil manufacturing is facilitated since the entire coil is constructed as a PCB prototype.

Keywords: MRI. Magnetic resonance. Phased array coil.

Referências:

- 1 HEIDEMANN, R. M. et al. A brief review of parallel magnetic resonance Imaging . **European Radiology**, v.13, n.10, p. 2323-2337, Oct. 2003. .
- 2 OHLIGER, A.; SODICKSON, D. K. An introduction to coil array design for parallel MRI. **NMR in Biomedicine**, v. 19, n. 3, p. 300-315, 2006.
- 3 PRUESSMANN, K. P. et al. SENSE: sensitivity encoding for fast MRI. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 42, p. 952-962,1999.

PG57

Development of a low-cost and fast-response genosensor

CORRER, W.¹; ZUCOLOTTI, V.¹

wcorrer@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The fast detection of infectious diseases are highly desirable to provide an early diagnosis. Currently, the most common strategy employed to detect DNA sequences is PCR (Polymerase Chain Reaction). Nevertheless, in the last few years research on genosensors has increased significantly. Genosensors presents as an alternative to PCR in the detection of specific DNA sequences, once they are faster, exhibit lower limits of detection, and requires simpler samples preparation. Detection is based on the immobilization of a probe sequence, complementary to the target sequence, on indium-tin oxide (ITO) electrodes. After placed in contact with the target sequence, hybridization occurs between the probe sequence and part of the target, which induces changes on electrical properties of surface of the electrode. Our goal in this project is to study the DNA immobilization through silanization chemistry (1) and develop an electrochemical genosensor for HPV virus, which some subtypes are highly correlated to cervical cancer.

Keywords: Genosensor. Biosensor. HPV.

Referências:

1 BEAUCAGE, S. L. Strategies in the preparation of DNA oligonucleotide arrays for diagnostic applications. **Current Medicinal Chemistry**, v. 8, n. 10, p. 1213-1244, 2001.

PG58

Electrical properties of P3HT:PCBM thin films used as active layers in organic solar cells

COUTINHO, D. J.¹; FARIA, R. M.¹

douglas@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The knowledge of electrical transport phenomena in organic solar cells (OSCs) is of crucial importance to improve their performance. (1) This work treats with investigation of charge carrier generation, dissociation-recombination mechanism and measurements of charge carrier mobility in blended thin films composed by regio-regular Poly(3-hexylthiophene (rr-P3HT) and 1-(3-methoxycarbonyl)propyl-1-phenyl [6,6]C61 (PCBM). This blend forms a biphasic morphology in which the photon absorption occurs at the P3HT phase, generating exciton species, which diffuses towards the P3HT/PCBM interface where the exciton dissociation in positive-negative charges carriers occurs. The transport, therefore is ambipolar: electrons move along PCBM paths, and holes along P3HT ones. Finally, the carriers are collected by the electrodes. Using techniques as Photo-CELIV, impedanciometry, and decay current after a voltage pulse, that were carried out in photovoltaic devices of P3HT:PCBM thin films at different temperatures, we studied the effects involving the exciton generation and dissociation, charge recombination, electric transport, and charge collection. The combination of these experimental measurements and the device modeling helped us to understand the correlation between the performance and the basic physics principles involving the charge generation in OSCs. Beyond the improvement on efficiency in such devices, the processes involving the degradation of OSCs are also investigated in this project. Records in efficiency have been achieved every year but the operation time is one of the limiting factors needed to be overcome. The reduced lifetime is caused by the environmental action, mainly degradation by water and oxygen. In particular, the oxygen action on the charge transport properties results in doping effect, generation of trap levels, and considerable changes in the electrical properties. (2) The formation of a reversible charge transfer complex in P3HT, caused by the interaction with oxygen molecules, has been considered the reason for the increase of charge carrier concentration and the decreased of charge carrier mobility in P3HT:PCBM films. In this picture, electrons are transferred from P3HT to oxygen molecules, thus generating p-doped states in a P3HT film, and consequently changing its conductivity. The great inertial mass of oxygen anions makes them immobile charges. Charge transport in conjugated polymer structures is strongly affected by traps of charge carriers, which can be either intrinsically generated by its own structure, as defects along the chain backbones or at amorphous/crystalline interfaces, or from impurities. In this work, we explored the origin of two current extraction by linearly increasing voltage measurements (CELIV) peaks recorded in a simple ITO/rr-P3HT/Ag device structure. Devices that have been protect from contact with air, displayed only one CELIV peak. However, as the device was exposed to air this peak has suffered a gradual decline in intensity, while another peak arose and swelled up. This phenomenon is then discussed in terms of formation of p-traps due to the action of oxygen molecules on the P3HT structure.

Keywords: Organic solar cell. P3HT:PCBM. Oxygen doping.

Referências:

1 MIHAILETCHI, V. D. et al. Charge transport and photocurrent generation in poly(3-hexylthiophene): methanofullerene bulk-heterojunction solar cells. **Advanced Functional Materials**, v. 16, n. 5, p. 699-708, 2006.

2 TRUKHANOV, V. A.; BRUEVICH, V. V.; PARASCHUK, D. Y. Effect of doping on performance of organic solar cells. **Physical Review B**, v. 84, n. 20, p. 205318-1-205318-14, 2011.

PG59

Majorana modes in a quantum dot

CRUZ, A. R.¹; VERNEK, E.¹; EGUES, J. C.¹

adonai@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work we investigate signatures of Majorana bound states through quantum transport in nanostructures composed of a quantum dot connected to source and drain leads and side coupled to topological superconducting nanowires sustaining Majorana end modes. Modeling the nanowire via a Kitaev chain, we use a recursive Green's-function approach to calculate the conductance and local density of states (LDOS) of a dot side coupled to a *single* wire. (1) As shown in Ref. (1), the LDOS clearly shows a leakage of the Majorana end mode from the wire into the dot, where it emerges as a unique dot level pinned to the Fermi energy of the leads (ϵ_f). The calculated two-terminal conductance through the dot shows an unambiguous signature for Majorana bound states, i. e., a pinned resonance occurring even when the dot level is far above ϵ_f . Motivated by these earlier results in our group, we now consider a quantum dot side coupled to *two* topological superconducting nanowires. More specifically, we consider a "cross geometry" in which the dot is attached to a source and drain (longitudinal direction) while being connected to two Kitaev chains that meet at the dot position (middle of the cross). This geometry is particularly interesting to investigate the fusion of Majorana end modes within the dot. We do not anticipate technical difficulties in carrying out this project. This work is funded by FAPESP, FAPEMIG, CNPq, CAPES, PRP-USP Q-NANO.

Keywords: Majorana fermions. Topological superconductivity. Quantum dot.

Referências:

1 VERNEK, E.; PENTEADO, P. H.; SERIDONIO, A. C.; EGUES, J. C. Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. **Physical Review B**, v. 89, n. 16, p. 165314-1-165314-5, 2014.

PG60

Estudo da microestrutura de polímeros conjugados via ressonância magnética nuclear

CUNHA, G. P.¹; deAZEVEDO, E. R.¹; FARIA, G. C.¹

giovanni_p@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Materiais poliméricos semicondutores tem recebido grande atenção recentemente devido a sua fácil processabilidade, baixo custo de fabricação e vasta aplicabilidade na produção de transistores, diodos, fotovoltaicos, etc. A grande maioria desses materiais tem natureza semicristalina, ou seja, são constituídos por regiões ordenadas imersas em uma matriz amorfa. Essa morfologia complexa pode variar com vários fatores, incluindo condições de processamento, tratamentos térmicos e solventes utilizados na preparação. Por outro lado, a microestrutura dos materiais está intimamente relacionada com várias de suas propriedades físicas, afetando, por exemplo, a mobilidade dos portadores de carga e os processos de recombinação e formação de éxcitons. Neste sentido, um bom entendimento da microestrutura dos polímeros conjugados torna-se fundamental não só para compreender os mecanismos de transporte nesses materiais, mas também para estabelecer as melhores condições de preparo e processamento que contribuem para melhorar a eficiência de dispositivos eletrônicos orgânicos que os utilizam como camada ativa. No entanto, devido a alta complexidade dos processos de formação de agregados moleculares e cristalitos, o entendimento sobre tais processos ainda é limitado. Assim, há vários esforços recentes que utilizam técnicas de caracterização física para estudar a microestrutura, morfologia e dinâmica dos polímeros conjugados. (1) Dentre elas estudos utilizando ressonância magnética nuclear (RMN) tem grande potencial tanto para elucidar variações estruturais (2) e dinâmicas (3) como para sondar a dinâmica dos processos de cristalização e formação de agregados moleculares. Neste sentido, neste projeto propomos estudar a dinâmica dos processos de formação de regiões cristalinas e agregados moleculares utilizando técnicas de RMN no estado sólido (SSNMR) e no domínio do tempo (TDNMR). Enquanto SSNMR fornece informações sobre a conformação e dinâmica de sítios moleculares específicos, TDNMR pode ser utilizada para acompanhar in situ a formação de domínios rígidos decorrente da cristalização, assim como caracterizar os parâmetros cinéticos desses. Assim, a ideia fundamental é identificar e caracterizar mudanças conformacionais e dinâmicas decorrentes da cristalização induzida por tratamentos térmicos utilizando técnicas de SSNMR e então acompanhar a dinâmica dos processos utilizando TDNMR. De início, a metodologia de estudo será testada em oligômeros de penta-fluorenos, cujos processos de cristalização são bem conhecidos, como sistema modelo. Em uma segunda etapa, aplicaremos as metodologias para estudar processos de cristalização em sistemas de interesse como o polímero poly(3-ethylhexylthiophene) (P3EHT) e o polímero semiconductor tipo N P(NDI2OD-T2). Por fim, pretendemos confrontar os resultados com a performance elétrica de dispositivos eletrônicos que utilizam esses materiais como camada ativa, visado entender como esses processos de cristalização afetam as propriedades de interesse.

Palavras-chave: Polímeros. Ressonância magnética nuclear. Microestrutura.

Referências:

- 1 PASCUI, O. F. et al. High crystallinity and nature of crystal-crystal phase transformations in regioregular poly(3-hexylthiophene). **Macromolecules**, v. 43, n. 22, p. 9401-9410, 2010.
- 2 GRAF, R. et al. Advanced magnetic resonance strategies for the elucidation of nanostructured soft matter. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 16, n. 21, p. 9700, 2014 .
- 3 DUONG, D. T. et al. Mechanism of crystallization and implications for charge transport in poly(3-ethylhexylthiophene) thin films. **Advanced Functional Materials**, v. 24, n. 28, p. 4515-4521, 2014.

PG61

Geração de ensembles e cálculos de energia livre na aplicação de Monte Carlo em um algoritmo de docking

CUNHA, J. V. S.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

joao.victor.cunha@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As interações moleculares, em especial as de caráter não covalente, são processos-chave em vários aspectos da biologia celular e molecular, desde a comunicação entre as células ou da velocidade e especificidade das reações enzimáticas. Portanto, há a necessidade de estudar e criar métodos preditivos para calcular a afinidade entre moléculas nos processos de interação, os quais encontram uma gama de aplicações, incluindo a modelagem de novos fármacos. No geral, entre esses valores de afinidade, o mais importante é a energia livre de ligação, que normalmente é determinada por modos computacionalmente rápidos, porém sem uma forte base teórica, ou por cálculos muito complexos, utilizando dinâmica molecular, onde mesmo com um grande poder de determinação da afinidade, é muito custoso computacionalmente. O objetivo desse trabalho é apresentar um terceiro modelo, o qual se encontra mais fortemente embasado na termodinâmica estatística, e não é tão custoso computacionalmente, promovendo um aprofundamento dos dados obtidos a partir de simulações de docking molecular, utilizando métodos computacionais de Monte-Carlo, para obtenção dos valores de energia livre de ligação. Após a implementação desse algoritmo e testá-lo perante dados experimentais concisos, neste caso aos valores das energias de ligação proteína mutante da lisozima L99A do vírus T4, espera-se a obtenção uma nova ferramenta poderosa e eficaz para cálculos de energias livres entre proteínas e ligantes de interesse médicos e biotecnológicos. No estágio o qual o projeto esta, as análises sobre a simulação já foram feitas, obtendo os fatores de decorrelação estatística, e analisando as frequências das energias em comparação com simulações de Dinâmica Molecular. Neste momento, o estudo do cálculo da energia livre utilizando termodinâmica estatística, onde a função de partição utilizada está baseada, em primeira instância, em (1) e (2), já se encontra tendo bons avanços. Em seguida, os estudos comparativos com métodos de cálculo de energia livre já utilizados serão efetuados.

Palavras-chave: Monte Carlo . Energia livre . Interações biomoleculares .

Referências:

1 PURISIMA, E. O.; HOGUES, H. Protein-ligand binding free energies from exhaustive docking. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 116, n. 23, p. 6872-6879, 2012.

2 UCISIK, M. N.; ZHENG, Z.; FAVER, J. C.; MERZ, K. M. Bringing clarity to the prediction of protein-ligand binding free energies via "blurring". **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 10, n. 3, p. 1314-1325, 2014.

PG62

Rational synthesis of a cocrystal: 5-fluorouracil and 5-fluorocytosine

DA SILVA, C. C. P.¹; ELLENA, J.¹

cecycarol@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Crystal engineering and supramolecular chemistry are emerging issues in the rational synthesis of improved active pharmaceutical ingredients (APIs). Achieving the ability to explore and predict the formation of intermolecular interactions among APIs and other molecules is a challenge to scientists. Over the past three years, our group has focused in searching a key coformer. 5-fluorocytosine showed to be a suitable molecule, allowing the prediction and formation of salts and cocrystals based on the pKa rule. (1-2). As an application of a controlled rational supramolecular synthesis of new solid forms involving an API, using 5-FC as co-former, we designed a co-crystal of 5-FC and 5-fluorouracil (5-FU), an antineoplastic drug. Although its intense use for cancer treatment, only a fraction of the administered amount of 5-FU becomes available in the systemic circulation after oral administration due to its poor water solubility. (3) In this sense we believe that cocrystallization may help toward improving the physycual and chemical properties of 5-FU. The cocrystal of 5-FU with 5-FC crystallizes in the monoclinic space group P21/c and exhibits one molecule of 5-FC and one of 5-FU in its asymmetric unit. The main intermolecular interactions responsible for maintaining the crystalline arrangement of this co-crystal are of the types NHO and NHF. Non-classical intermolecular interactions (CHF, CHN and CHO) are also present, as a result of the close packing. The crystal packing is composed of flat tapes, stacked constituting columns with a parallel displaced arrangement. Adjacent tapes exhibit two directions of growth and are connected to one another by 5-FC/5-FU intermolecular interactions. The solubility properties of this new cocrystal are still under investigation.

Keywords: Cocrystallization. Crystal engineering. 5-Fluorocytosine.

Referências:

- 1 DA SILVA, C. C. P.; OLIVEIRA, R.; TENORIO, J. C.; HONORATO, S. B.; AYALA, A. P.; ELLENA, J. The continuum in 5-fluorocytosine: toward salt formation. **Crystal Growth & Design**, v. 13, n. 10, p. 4315-4322, 2013.
- 2 DA SILVA, C. C. P.; PEPINO, R. O.; DE MELO, C. C.; TENORIO, J. C.; ELLENA, J. Controlled synthesis of new 5-fluorocytosine cocrystals based on the pKa rule. **Crystal Growth & Design**, 2014. doi: 10.1021/cg500502j. In press.
- 3 BAKER, S. D.; KHOR, S. P.; ADJEI, A. A.; DOUCETTE, M.; SPECTOR, T.; DONEHOWER, R. C.; GROCHOW, L. B.; SARTORIUS, S. E.; NOE, D. A., HOHNEKER, J. A.; ROWINSKY, E. K. Pharmacokinetic, oral bioavailability, and safety study of fluorouracil in patients treated with 776C85,



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

an inactivator of dihydropyrimidine dehydrogenase. **Journal of Clinical Oncology**, v. 14, n. 12, p. 3085-3096, 1996.

PG63

Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida

DE CASTRO, L. A.¹; NAPOLITANO, R. J.¹

leonardo.castro@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Estudamos a dinâmica do processo contínuo de medida de um sistema quântico de dois níveis (qubit) sujeito a perturbações introduzidas pelo ambiente. O processamento de informação quântica requer uma evolução temporal determinística do estado inicial seguida de uma medição. Descrevemos o processo completo que envolve a perturbação e as medidas de forma unificada, através de uma equação-mestra híbrida não-markoviana (1,2), que será adaptada também para tratar o caso mais realista em que o ambiente apresenta memória. Baseado em estudos anteriores de nosso grupo (3), e na teoria de proteção de erros por efeito Zenão quântico, abordaremos as propriedades protetivas da medida aplicadas à preservação do estado do sistema. Além de combinarmos esse estudo com a teoria quântica de correção de erros, de forma a determinar quais as medidas adequadas para proteger cada estado, verificaremos como a escolha do ambiente determina a evolução do sistema, em que casos ocorrem Efeitos Zenão e Anti-Zenão quânticos. Compararemos tais resultados com aqueles de um modelo em que as medidas são descritas através de uma série de passos próximos entre si. Finalmente, proporemos formas experimentais para testar qual dos modelos de medida é mais adequado para descrever a realidade.

Palavras-chave: Medidas contínuas. Sistemas abertos. Informação quântica.

Referências:

- 1 CRESSER, J. D.; BARNETT, S. M.; JEFFERS, J.; PEGG, D. T. Measurement master equation. **Optics Communications**, v. 264, n. 2, p. 352-361, 2006. doi:10.1016/j.optcom.2006.02.061.
- 2 BRASIL, C. A.; NAPOLITANO, R. J. The master equation for the reduced open-system dynamics, including a Lindbladian description of finite-duration measurement. **European Physical Journal Plus**, v. 126, n. 10, p. 91-1-91-12, 2011. doi:10.1140/epjp/i2011-11091-y.
- 3 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, v. 84, n. 2, p. 022112-1-022112-16, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.022112.

PG64

Estudos físicos conduzidos sobre proteína auxiliar de invasão do *E. faecalis*, ElrA, e seu regulador transcripcional ElrR

DE GROOTE, M. C. R.¹; HORJALES, E.¹

mdegroote@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O *Enterococcus faecalis* é um patógeno nosocomial comum em diversos países (1), recentemente uma nova cepa, resistente a Vancomicina, tem causado sérios problemas de saúde. A invasão dessa bactéria é auxiliada por uma proteína, chamada ElrA, que por sua vez tem sua expressão regulada por outra proteína, chamada ElrR. (2) A ElrR é uma proteína considerada pertencente à super-família Rgg, comum em bactérias Gram positivas, possui em sua extremidade N-terminal um domínio hélice-volta-hélice (HTH) de ligação ao DNA e na porção C-terminal um sítio alostérico (1) que produz a alteração conformacional de toda a proteína. A ElrR apresenta-se em solução na forma dimérica, com aproximadamente 75KDa, e liga-se a uma porção do DNA, (suposta) de 23 pares de base, próxima ao gene de expressão da ElrA. A proteína ElrA de tamanho aproximado de 78KDa, apresenta-se em solução em três diferentes formas, monomérica, dimérica e tetramérica. É, segundo as pesquisas realizadas, homóloga à Internalina B de *Listeria monocytogenes*. A ElrA apresenta um domínio WxL em sua porção C-terminal e três domínios LRR em sua composição. Estima-se que essa proteína, assim como sua homóloga, possui a capacidade de se ligar a carboidratos ligados à membrana expostos no meio extracelular e de alguma forma auxilia na invasão do *E. faecalis*. Testes de anisotropia de fluorescência, calorimetria e ressonância plasmônica de superfície serão realizados com a proteína ElrR recombinante juntamente com a provável região de ligação do DNA para confirmação da mesma, bem como para definição das constantes de afinidade. Atualmente temos cristalizada essa proteína isolada. Também foram conduzidos testes de cristalização da proteína com dois diferentes ligantes e com substituição das metioninas por selênio-metioninas, bem como do complexo ElrR/DNA. Para confirmação da incorporação das selênio-metioninas será conduzido ensaio de "Inductively Coupled Plasma Emission Analysis", e para confirmação dos ligantes e do complexo será realizada difração dos cristais por raio-X. Com a proteína ElrA recombinante ainda existem dificuldades com a purificação, uma vez que o rendimento da proteína purificada é baixo, ainda assim foi possível realizar ensaios de cristalização que renderam alguns cristais que estão congelados esperando para serem difratados por raio-X para confirmação da cristalização da proteína.

Palavras-chave: *Enterococcus faecalis*. Invasão celular. Regulação transcripcional.

Referências:

- 1 BRINSTER, S. et al. Enterococcal leucine rich repeat containing protein involved in virulence and host inflammatory response. **Infection and Immunity**, v. 75, n. 9, p. 4463-4471, 2007.
- 2 DUMOULIN, R. et al. Enterococcal Rgg like regulator ElrR activates expression of the elrA operon. **Journal of Bacteriology**, v. 195, n. 13, p. 3073-3083, 2013.

PG65

Gamma ray astronomy

DIPOLD, J.¹; SOUZA, V.¹

jessica.dipold@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Gamma rays are the most energetic form of light, billions of times more energetic than visible photons. Through the measurement of this kind of radiation coming from space, we are able to study phenomena like the emission from supernova explosions, pulsars and black holes, as well as gamma ray bursts, which are one of the greatest mysteries in modern astrophysics. There are several types of instruments used to make astrophysical observations in gamma rays, but the main ones are Imaging Cherenkov Telescopes. These are able to reconstruct the trajectory of the gamma rays during its passage through the atmosphere by observing its Cherenkov radiation. HESS(Namibia) and VERITAS (USA) are examples of several current successful experiments that use this observation technique. Recently a new observatory started to be developed, the Cherenkov Telescope Array (CTA) (1) that will be able to observe sources with a flux of emission one order of magnitude lower than the present experiments and consequently will increase substantially the number of detectable objects. CTA will consist of several tens of Cherenkov telescopes with different sizes that will make observations in different regions of the gamma ray spectrum. The site where the observatory will be constructed is going to be chosen in the next months, and to be able to do so many geographical and climatic analysis are necessary for all proposed sites. One of the most relevant characteristics for this choice is the observation time. It is directly related with the humidity of the site, which may lead to partial or complete covering of the sky through the formation of clouds and to the condensation of the mirror surface. One of the proposed sites is located in Argentina, near the city of San Antonio de los Cobres, at the north of the country. There, it was built an outdoor test facility (2) in order to monitor the optical and mechanical properties of three 1.5 m mirror facets, from France, Italy and Poland, as well as one dielectrical mirror from the HESSII telescope. These are exposed to the local atmospheric conditions for a given period of time. The reflective surface is watched remotely by individual webcams that take pictures during the night, providing us with data to observe daily changes in the quality of the mirrors surfaces as well as if they condensate in that period. In this study we present the analysis of the condensation pictures, as well as how we classify them between condensated and not-condensated. We will also show how the humidity and temperature variance affects these states, developing a model that will connect the climatic parameters to the condensability of each of the mirror facets exposed. Through these data, we intend to develop a model for mirror condensation that can be used in the all possible sites.

Keywords: Gamma rays. Mirrors. Cherenkov telescope array.

Referências:

1 ACHARYA, B. S. et al. Introducing the CTA concept. **Astroparticle Physics**, v. 43, p. 3-18, 2013. Edição especial.

2 MEDINA, M. C. et al. An outdoor test facility for the Cherenkov Telescopes Array mirrors. In: INTERNATIONAL COSMIC RAY CONFERENCE, 33., 2013, Rio de Janeiro. **Proceedings...** . Rio de Janeiro: Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 2013. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1307.4965>>. Acesso em: 8 ago. 2013.

PG66

Sensores ópticos baseados na reflexão interna

DOMENEGUETI, J. F. M.¹; ZILIO, S. C.¹

jose.domeneguetti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O índice de refração (IR) de um determinado material está fundamentalmente relacionado às propriedades eletrônicas deste e específica a maioria de suas propriedades ópticas. O IR apresenta dependência com vários parâmetros externos como, temperatura, pressão, umidade, concentração de espécies químicas, entre outros, originando diversos fenômenos ópticos. Isso motiva o desenvolvimento de novas técnicas visando a determinação precisa do IR. Nesse contexto, o presente projeto tem por objetivo o desenvolvimento de sensores ópticos de umidade relativa e bio-sensores de afinidade química. Com essa finalidade, será empregada uma técnica recentemente apresentada (1) que permite a determinação do ângulo crítico da reflexão interna, que é um parâmetro que depende do IR, por meio da interferência das duas componentes de polarização do campo elétrico da luz. Nessa técnica, exploramos a diferença de fase adquirida pelas componentes $-s$ e $-p$ para gerar um padrão de interferência que apresenta um mínimo de intensidade luminosa numa posição correspondente ao ângulo crítico da reflexão interna. No caso do higrômetro, pretendemos estudar diferentes materiais e métodos de deposição de filmes finos com o objetivo de melhorar as características de sensoriamento já apresentadas em trabalhos anteriores. (2) Para os bio-sensores de afinidade química, temos o intuito de demonstrar que o presente método pode substituir com vantagens aqueles empregados atualmente, que em geral são baseados na excitação de plasmons superficiais, visando o desenvolvimento de um dispositivo que possa ser aplicado no estudo da dinâmica de interação entre pares ligante/analito específicos.

Palavras-chave: Refratometria. Sensores ópticos. Ângulo crítico.

Referências:

- 1 ZILIO, S. C. A simple method to measure critical angles for differential refractometry. **Optics Express**, v. 20, n. 2, p. 1862-1867, 2012.
- 2 DOMENEGUETI, J. F. M.; ZILIO S. C. Humidity and pressure sensor based on the internal reflection. **Applied Optics**, v. 53, n. 8, p. 1591-1596, 2014.

PG67

Comparative analysis of bones with complex networks

DORO NETO, C.¹; FONTOURA COSTA, L. da¹

carlos.doro.neto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Bones are essential for the protection of internal organs, for body structure, and for mechanical support in several animals, and present a complex network of channels (Havers and Volkmann channels) required to nourish tissue cells. However, the lack of quantitative studies leads to scarce parameters and measures to characterize these structures. Via computational graphic design, image processing techniques, and complex networks we will describe the obtainment, reconstruction, representation, and analysis of these channel networks. Two distal phalanges (one from a hen and one from a rooster) were submitted to histological section processing. Slices were photographed and images were treated before 3D reconstruction. Volumes were converted into complex networks that allow us to use methods of analysis widely accepted in literature. Networks were compared with each other and with the network obtained in the study by Viana et al(1-2) using degree analysis, hub positioning, community detection, and random and systematic attacks. Four results stand out: (i) networks show a predominantly dichotomic division of channels; (ii) channels do not show specific spatial distribution; (iii) channels show high modularity, indicating that specific areas perform specific functions; and (iv) networks are resistant to systematic attacks, but not to random attacks.

Keywords: Image processing. Complex network. Bones.

Referências:

1 VIANA, M. P. et al. **Modularity and robustness of bone networks**. Disponível em: <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2009/mb/b814188f>>. Acesso em: 07 ago. 2014.

2 FONTOURA COSTA, L. da; VIANA, M. P.; BELETTI, M. E. **Complex channel networks of bone structure**. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/q-bio/0412042.pdf>>. Acesso em: 07 ago. 2014.

PG68

Ozone gas sensor based on strontium titanate film obtained by spin-coating deposition

ESCANHOELA JÚNIOR, C. A.¹; SILVA, L. F.²; AGUIR, K.³; MASTELARO, V. R.¹

carlosescanhoela@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química - UNESP

³Aix-Marseille Université

Gas sensor based on thin films have allowed for the detection of an important set of gases in several environmental control. It becomes important to focus a research on the development of low-cost gas sensors in order to access applications where the use of conventional analytical systems is prohibitively expensive. (1) Recently in the literature, the strontium titanate doped with iron was suggested as a good candidate for application as ozone gas sensors. (1) Strontium titanate (ST) has been extensively explored as gas sensors. This material is widely studied due the facility to incorporate different ions in its structure. The aim of this study was the synthesis and characterization of $\text{SrTi}_{0.85}\text{Fe}_{0.15}\text{O}_3$ (STF) and $\text{Sr}_{0.98}\text{La}_{0.02}\text{Ti}_{0.85}\text{Fe}_{0.15}\text{O}_3$ (SLTF) thin films in order to verify their ozone sensing properties. The thin films were synthesized by a polymeric precursor method followed with spin-coating and heat treatment at two different temperatures 500 and 600 °C/4h. The crystalline phase and morphological features were investigated by X-ray diffraction (XRD), X-ray Absorption Near Edge Structure (XANES) and field-emission scanning electron microscopy (FE-SEM). The thickness of the films were observed around 100 nm by electronic microscopy (FEG-SEM). X-ray diffraction (XRD) technique showed that both compositions present only a single cubic phase similar to the SrTiO_3 . The Ti K-edge structure X-ray Absorption Near Edge Structure (XANES) spectra of films heated at 600 °C/4h compared to 500 °C/4h indicates an increase of the local order around Ti atom caused by different heat treatment. The electrical characteristic of the thin films as a function of sample composition and temperature were evaluated regarding the response to ozone gas at 300 °C. The O_3 gas was generated by oxidizing oxygen molecules of dry air by a pen-ray UV lamp calibrated to give an O_3 concentration range 0.4 to 3.2 ppm. The samples showed a p-type semiconducting characteristic since their resistance decrease with the adsorption of oxidizing gases. The SLTF film showed the best sensor response, $S = \frac{R_{Air}}{R_{Gas}}$ ($R_{Gas} < R_{Air}$), to 0.4 ppm of ozone gas, as well as a short response time ~ 14 seconds. The present study shows that thin films composed of $\text{SrTi}_{0.85}\text{Fe}_{0.15}\text{O}_3$ (STF) and $\text{Sr}_{0.98}\text{La}_{0.02}\text{Ti}_{0.85}\text{Fe}_{0.15}\text{O}_3$ (SLTF) can be synthesized by polymeric precursor method followed with spin-coating. The gas sensing measurements showed that the sensor film with La exhibited a better sensitivity as well as a short response time to ozone gas.

Keywords: Gas sensor. Thin films. Strontium titanate.

Referências:



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

1 FERGUS, J. W. Perovskite oxides for semiconductor-based gas sensors. **Sensor and Actuators B**, v. 123, n. 2, p. 1169-1179, 2007.

PG69

Transporte controlado por barreiras em dispositivos semicondutores orgânicos de múltiplas camadas

ESPIRITO SANTO, T. S. do¹; GUIMARAES, F. E. G.¹; FARIA, R. M.¹

tiagosantiago@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Ao longo dos últimos anos, heteroestruturas orgânicas promissoras têm sido preparadas com sucesso por técnicas de evaporação/sublimação de moléculas pequenas e, principalmente por *spincast*, a partir de soluções de polímeros emissores de luz. Estruturas contendo barreiras inorgânicas e orgânicas têm sido utilizadas para controlar o transporte e recombinação de portadores e aumentar a eficiência em dispositivos optoeletrônicos. No presente trabalho, serão apresentadas as propriedades de transporte em heteroestruturas planares, com modulação energética em forma de barreira de potencial, preparadas a partir de diferentes materiais poliméricos que possuem diferentes lacunas (*gap* de energia entre níveis LUMO e HOMO ou tipo I) e alinhamento de energia (do tipo II). A deposição das multicamadas poliméricas serão preparadas dentro de uma *Glove Box* pela técnica *Spin assisted LbL* (Sa-LbL), que combina deposição *Layer-by-Layer* (LbL) de multicamadas de polieletrólitos com deposição de filmes por *spincast* (1), o anodo de ITO/Au (injeção de buracos) e o catodo metálico de Ca/Al (injeção de elétrons) serão depositados por litografia ótica e evaporação a vácuo. (2) Curvas de corrente por diferença de potencial ($I \times V$), em estruturas poliméricas com um portador de carga, contendo uma ou duas barreiras, mostram efeitos de impedância negativa mesmo à temperatura ambiente (2), o que pode ser associado com o acúmulo e tunelamento de portadores através das barreiras. O transporte nessas estruturas em função da temperatura (4 a 300 K) e da largura da barreira será apresentado.

Palavras-chave: Heteroestruturas orgânicas. Polímeros emissores. Transporte de carga.

Referências:

1 VALE, M. M. do. **Dinâmica excitônica em estruturas poliméricas multicamadas**. 2014. 109p. Tese (Doutorado em Ciências e Engenharia de Materiais) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

2 HECK, V. C. **Propriedades de transporte e emissão em OLEDs contendo poços e barreiras de potencia**. Dissertação (Mestrado em Ciências e Engenharia de Materiais), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos. Em andamento.

PG70

Recombinant production and crystallization of the pectinases from *Bacillus licheniformis* and *Xanthomonas campestris*

EVANGELISTA, D. E.¹; POLIKARPOV, I.¹

daniloe@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Pectin is the major component of the middle lamella, contributing to the structure support and protection of plant tissues. Pectin is mainly composed of galacturonic acid units linked by alpha-1,4 glycosidic bonds, which is partially esterified by methyl groups. This polysaccharide is naturally degraded by pectinases, such as the Endo-polygalacturonase that randomly cleaves the alpha-1,4 bonds. Pectinases are involved in the plant cell wall development, micro-organisms enzymatic arsenal used to attack plants and have also a wide range of application in the industrial sector. There are a wide range of micro-organisms known to be efficient phytopathogens and because they are used as a prospecting source of plant cell wall degrading enzymes (PCWDE). Two examples of these micro-organisms are the *Bacillus licheniformis* (The grass bacillus) and *Xanthomonas campestris*. Our group had identified a large number of PCWDE genes, including pectinases, from these two micro-organisms. Considering the importance of pectinases in biological studies and their several industrial applications, we promote the recombinant production of an endo-polygalacturonase from *B. licheniformis* (GBM-B0020) and an endo-polygalacturonase from *X. campestris* (GBM-B0064). These recombinant enzymes were purified and crystallized for further biochemical and X-ray crystallographic studies. The ORFs were linked into a LIC (Ligation Independent of Cloning) expression vector (1), which has a promoter induced by lactose; the thioredoxin protein to increase the solubility of the recombinant protein; and the histidine tail for easier purification. The recombinant plasmid was used to transform competent *E. coli* and the recombinant clones, which were cultivated in medium containing lactose. The recombinant clones produced a large amount of the recombinant enzymes, which were purified by affinity chromatography in a nickel column, cleaved out the thioredoxin protein and the histag to subsequently separated by gel filtration. The purified recombinant enzymes activity was confirmed by halos of consumed substrate in a matrix gel containing 1% esterified-polygalacturonic acid and samples of the enzymes. For crystallization screening, the sitting-drop vapor-diffusion method was used, in which 1 μ L of protein solution was mixed with 1 μ L of reservoir solution at 292 K. Initial crystallization screens were carried out using the automated robotic system Honey Bee 961 Dispensing System (DIGLABTM) and commercial crystallization kits (Index from Hampton research, Pact, PEGs I and II Suite from Qiagen, SaltRx from Hampton research). After 18 days, crystals were observed only for the GBM-B0064 recombinant protein in the Pact Suite kit with 20% (w/v) PEG 6,000, 0.2 M ammonium chloride, 0.1 M HEPES pH 7.0 as a crystallization solution and (2:1 v/v) protein-to-crystallization solution ratio. X-ray diffraction data for GBM-B0064 crystal will be collected as soon as possible, in addition it will be determinate, for both recombinant enzymes, the biochemical parameters: pH, temperature, thermostability and the kinetic parameters (V_{max} , K_m and K_{cat}).

Keywords: Endo-polygalacturonases. Crystallization. Phytopathogen.

Referências:

1 CAMILO, C. M.; POLIKARPOV, I. High throughput cloning, expression and purification of glycoside hydrolases using Ligation Independent Cloning, LIC. **Protein Expression and Purification**, v. 99, p. 35-42, 2014. doi: 10.1016/j.pep.2014.03.008.

PG71

Estruturas sociais e fluxos de informação: análises para o participante

FABBRI, R.¹; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de¹

renato.fabbri@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os rastros das atividades em redes sociais permitem a detecção de comunidades e papéis desempenhados pelos indivíduos. (1-2) No entanto, não há uma abordagem focada no participante, em que as medidas e visualizações são voltadas para conscientizá-lo e capacitar seu aproveitamento dos mecanismos sociais. (3) Para isso, destacam-se as áreas de Redes Complexas, Processamento de Linguagem Natural e Participação Social. A segunda é dedicada à extração de informação dos textos, a primeira às relações em rede, a última à ação da sociedade civil nos assuntos públicos. Este arcabouço sustenta a apreensão e modelagem dos processos sociais. Como resultado, há contribuições para formalismos nas dinâmicas sociais, implementações computacionais voltadas para o participante e a escrita de textos acadêmicos. (1-3) Este trabalho conflui com uma série de trabalhos realizados por acadêmicos (e.g. IFSC/USP, CCNH/UFABC, Lappis/UnB), pela ONU (PNUD), órgãos do governos (SG/PR) e pela sociedade civil, em uma iniciativa conjunta estado-sociedade para um portal federal de participação social (Participa.br), com contribuições deste pesquisador.

Palavras-chave: Redes complexas. Processamento de linguagem natural. Participação social.

Referências:

- 1 FABBRI, R. et al. Stability in human interaction networks: primitive typology of vertex, prominence of measures and activity statistics. Disponível em: <<http://sourceforge.net/p/labmacambira/fimDoMundo/ci/master/tree/textos/evolutionSN/paper.pdf?format=raw>>. Acesso em: 11 ago. 2014.
- 2 FABBRI, R.; MAIA, L. P. **Elementary observations of textual production in interaction networks.** Disponível em: <<http://sourceforge.net/p/labmacambira/fimDoMundo/ci/master/tree/textos/IntNetText/ACM/paper.pdf?format=raw>>. Acesso em: 11 ago. 2014.
- 3 FABBRI, R. et al. **Ontologias, análises e software dos relatórios BRA/12/018:** Projeto de cooperação Técnica Internacional. PNUD. Disponível em: <<http://sourceforge.net/p/labmacambira/fimDoMundo/ci/master/tree/textosenogithubdotmhttps://github.com/ttm/pnud3/raw/master/latex/produto.pdf>>. Acesso em: 11 ago. 2014.

PG72

Nanoconjugates based upon polyethylene terephthalate brushes /Au nanoparticles for biosensing

FARIA, H. A. M.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

henrique.fisica@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Self-organization of nanoparticles confined in thin polymer brushes films have major interests in sensor applications. (1) Control of the surface chemistry is essential for assuring high reactivity, orientation and stability of biomolecules immobilized at biosensor. In spite of several useful schemas for attaching biomolecules onto electrode surface (2) the use of brush-like topology nanoparticle appers as a promise route for fabrication of nanostructured biosensors. In this study, we report a fabrication of polymer brushes conjugated with Au nanoparticles using UV radiation grafting. Polyethylene terephthalate substrate, 2-Hydroxyethyl methacrylate monomer and Au nanoparticles were exposed to UV Hg lamp (254 nm and 365 nm) for 25 minutes. The synthesis of the polymer brushes-nanoparticle was confirmed by Fourier transform infrared spectroscopy and atomic force microscopy. AFM analyses revealed that the Au nanoparticles had been efficiently attached to the polymeric brushes presented in the surface of the polymeric film. The nanoconjugates developed here represent an alternative route for fabrication of biorecognition layers for biosensors platforms.

Keywords: Polymer brushes. Grafting from. Polyethylene terephthalate.

Referências:

1 AZZARONI, O. Polymer brushes here, there, and everywhere: recent advances in their practical applications and emerging opportunities in multiple research fields. **Journal of Polymer Science A**, v. 50, n. 16, p. 3225-3258, 2012.

2 WANG, J. Electrochemical nucleic acid biosensors. In: PALECEK, E.; SCHELER, F.; WANG, J. (Ed.). **Electrochemistry of nucleic acids and proteins**: towards electrochemical sensors for genomics and proteomics. Amsterdam: Elsevier, 2005. v. 1. cap. 4, p. 175-194.

PG73

Busca de moldes estruturais para a engenharia de funções catalíticas

FARRO, E. G. S.¹; NASCIMENTO. A. S.¹

esuclupef@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A existência de uma relação entre a estrutura e a função de proteínas é bem conhecida. Sabe-se que as proteínas evoluíram para desenvolver uma estrutura estável e ótima para o exercício do seu papel funcional. No entanto, qual é a mínima informação necessária para a inserção de uma função proteica? Algumas abordagens já foram avaliadas neste contexto. Uma delas emprega o conceito de motivos espaciais esparsos para a definição de um papel funcional em enzimas, onde as coordenadas de alguns poucos aminoácidos são empregadas para a inferência de uma função. (1-3) Neste projeto, busca-se avaliar se a inserção de motivos espaciais esparsos de um sítio ativo razoavelmente simples é capaz de inserir elementos funcionais a uma proteína existente. Para esta finalidade, os motivos espaciais do sítio ativo de uma enzima polissacarídeo mono-oxigenase, que corresponde à hidrolase glicosídica da família 61 (GH61) e contem duas histidinas e uma tirosina coordenando um átomo de cobre (H1, H89 e Y176) foram utilizados como modelos estruturais de busca através do programa SPASM. Duas proteínas que contêm a disposição similar para esta tríade catalítica foram identificadas e são membros da família 43 das hidrolases glicosídicas (GH43). Os genes das duas enzimas foram identificados e clonados através do sistema LIC. Os insertos foram inseridos em um vetor contendo uma construção N-6xHis-Trx-TEV. Testes de expressão da primeira enzima (BaGH43A) cepas Rosetta de E. coli indicam uma expressão em quantidade significativa de proteína solúvel. As próximas etapas do projeto envolvem a cristalização da enzima e estudos da função da enzima BaGH43A quanto à sua capacidade de ligação ao cobre ou a outros cátions divalentes e sua eventual atividade oxidativa, bem como os estudos estruturais e funcionais da segunda enzima (BaGH34B).

Palavras-chave: Hidrolase glicosídico. GH61. GH43.

Referências:

1 KLEYWEGT, G. J. Recognition of spatial motifs in protein structures. **Journal of Molecular Biology**, v. 285, n. 4, p. 1887-1897, 1999.

2 WALLACE, A. C.; BORKAKOTI, N.; THORNTON, J. M. Tess: a geometric hashing algorithm for deriving 3d coordinate templates for searching structural databases. application to enzyme active sites. **Protein Science**, v. 6, n. 11, p. 2308-2323, 1997.

3 WALLACE, A. C.; LASKOWSKI, R. A.; THORNTON, J. M. Derivation of 3d coordinate templates for searching structural databases: application to ser-his-asp catalytic triads in the serine proteinases and lipases. **Protein Science**, v. 5, n. 6, p. 1001-1013, 1996.

PG74

Um novo modelo de execução a fluxo de dados

FERREIRA, F.¹; TRAVIESO, G.¹; RUGGIERO, C. A.¹

felipe2.ferreira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nas últimas décadas, a computação sequencial foi dominante, pois os arquitetos eram capazes de desenvolver computadores cada vez mais rápido através de melhorias nas técnicas de fabricação e otimizações na arquitetura e organização do processador, porém, devido a incapacidade do sistema em lidar com as altas latências das memórias (esse problema é conhecido como "Gargalo" de von Neumann), não foi possível manter essa tendência. (1) Técnicas para superar essa incapacidade foram desenvolvidas, que resultaram em uma nova barreira: a alta potência dissipada pelos processadores. É esse o motivo que fez os desenvolvedores mudarem para *chips* com mais de um núcleo de processamento (chamados de *multi-core*), que atualmente dominam o mercado. O aumento do número de núcleos aumenta a capacidade total de processamento, mas também aumenta a dificuldade de extraí-la e para isso é necessário desenvolver novos paradigmas de programação. É nesse contexto que a pesquisa é desenvolvida. O modelo a fluxo de dados, que foi alvo de muitas pesquisas nas décadas de 70 e 80, oferece um paradigma de programação onde, diferente do paradigma sequencial em que as instruções são executadas em ordem, as instruções são executadas de acordo com a disponibilidade dos dados. (2) Em linhas gerais, pretende-se desenvolver durante a pesquisa um novo modelo de execução que utilize os conceitos do modelo a fluxo de dados em processadores *multi-core* convencionais, pois não só é mais tolerante às altas latências, como também é intrinsecamente paralelo, facilitando a tarefa de obter o máximo desempenho possível.

Palavras-chave: Modelo de execução. Fluxo de dados. Computação paralela.

Referências:

1 PATTERSON, D. A.; HENNESY, J. L. **Computer organization and design: the hardware/software interface**. 5th ed. Amsterdam: Morgan Kaufmann, 2014.

2 ARANDI, S.; EVRIPIDOU, P. Programming multi-core architectures using data-flow techniques. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON EMBEDDED COMPUTER SYSTEMS, 10., 2010, Samos. **Proceedings...** Piscataway: IEEE, 2010. p.152-161.

PG75

Modelagem molecular de uma série sintética de agentes antichagásicos baseada em estudos de HQSAR e CoMFA

FIORAVANTI, C. M.¹; FERREIRA, L. L. G.¹; ANDRICOPULO, A. D.¹

cesar.fioravanti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A doença de Chagas possui cerca de 8 milhões de pessoas infectadas em todo o mundo, com aproximadamente 28 milhões sob risco de infecção.(1) Além de ser endêmica em 21 países da América Latina,(2) casos da doença têm sido registrados na América do Norte, Europa, Ásia e Oceania. Causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, a doença de Chagas é transmitida principalmente por meio das fezes de insetos conhecidos como barbeiros (dentre eles, o *Triatoma infestans*), enquanto se alimentam do sangue do hospedeiro. Classificada como uma doença tropical negligenciada de alta prioridade pela Organização Mundial da Saúde (OMS), a doença é considerada um sério problema médico e socioeconômico nos países em que é endêmica, trazendo graves consequências para as populações afetadas. Os fármacos disponíveis, desenvolvidos na década de 1970, são extremamente limitados e apresentam problemas como baixa eficácia e elevada toxicidade.¹ Um conjunto de 131 derivados ciano-piridinícos, com atividade anti-T. cruzi avaliada em nossos laboratórios, foi utilizado no desenvolvimento de estudos de relações quantitativas entre estrutura e atividade (QSAR, sigla do inglês para quantitative structure-activity relationships), utilizando as técnicas holograma QSAR (HQSAR, hologram QSAR) e análise comparativa de campos moleculares (CoMFA, comparative molecular field analysis). O método HQSAR gera os modelos através da fragmentação da estrutura bidimensional das moléculas. O método CoMFA, por sua vez, necessita de informações tridimensionais das moléculas, aspecto que impõe a necessidade da geração de um alinhamento molecular, o qual foi realizado a partir da máxima estrutura comum entre as moléculas. Para ambas as técnicas foram obtidos modelos com alta capacidade preditiva, validados por meio de parâmetros estatísticos de validação interna (q^2 e r^2) e externa (r^2_{pred}), com valores de $q^2 = 0,67$, $r^2 = 0,78$ e $r^2_{pred} = 0,70$ para o modelo HQSAR. Para o modelo CoMFA foram obtidos valores de $q^2 = 0,63$, $r^2 = 0,77$ e $r^2_{pred} = 0,66$. Estes resultados demonstram a boa capacidade de predição dos modelos para novas moléculas. Além disso, os modelos de QSAR desenvolvidos foram capazes de fornecer informações importantes para a compreensão das bases moleculares responsáveis pela atividade biológica deste conjunto de compostos. As informações obtidas são úteis na busca por moléculas mais potentes dentro da diversidade química estudada, contribuindo para o avanço nas pesquisas em química medicinal para o combate à doença de Chagas.

Palavras-chave: Chagas. QSAR. CoMFA.

Referências:

1 GEDES, P. M.; SILVA, G. K.; GUTIERREZ, F. R.; SILVA, J. S. Current status of Chagas disease chemotherapy. **Expert Review of Anti Infective Therapy**, v. 9, n. 5, p. 609-620, 2011.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

2 PETHERICK, A. Country by country. **Nature**, v. 465, n. 7301, p. S10, 2010. doi:10.1038/nature09223.

PG76

Absorção de dois fótons de sistemas moleculares ramificados

FONSECA, R. R.¹; VIVAS, M. G.¹; DE BONI, L.¹; MENDONÇA, C. R.¹

rubenfonseca@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos últimos anos, materiais orgânicos emergiram como candidatos para aplicações em dispositivos fotônicos, principalmente aqueles envolvendo processos de absorção multifônica. Os processos de absorção de dois fótons (1), por exemplo, têm sido usados em microfabricação via fotopolimerização, microscopia de fluorescência, limitação ótica, armazenamento ótico entre outros importantes fenômenos. Compostos orgânicos proporcionam vantagens em relação a outros, já que suas propriedades óticas podem ser modificadas ou otimizadas por estratégias de engenharia molecular. Neste trabalho, investigamos o processo de absorção de dois fótons de sistemas moleculares ramificados dipolares, quadrupolares e octopolares. Os espectros de absorção de dois fótons desses sistemas foram determinados através da técnica de varredura Z absorciva, usando pulsos laser de 120-fs provenientes de um amplificador ótico paramétrico bombeado por um pulso de 150-fs em 775 nm de um sistema amplificado de Ti:safira, operando numa taxa de repetição 1-kHz. Nosso principal objetivo é correlacionar às propriedades óticas não lineares destes sistemas moleculares, levando em conta suas estruturas multi-ramificadas.

Palavras-chave: Absorção de dois fótons. Sistemas moleculares ramificados. Varredura Z absorciva.

Referências:

1 VIVAS, M. G.; SILVA, D. L.; DE BONI, L.; ZALESNY, R.; BARTKOWIAK, W.; MENDONÇA, C. R. Two-photon absorption spectra of carotenoids compounds. **Journal of Applied Physics**, v. 109, n.10, p.103529-1-103529-8, 2011.

PG77

Medidas de refletância difusa para o aprimoramento da dosimetria para fototerapias

FORTUNATO, T. C.¹; KURACHI, C.¹; BAGNATO, V. S.¹; MORIYAMA, L. T.¹

thereza.fortunato@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O uso da luz como agente terapêutico tem sido alvo de diversos estudos, no entanto, a dosimetria para sua aplicação clínica ainda é bastante baseada em dados empíricos. A propagação da luz nos tecidos biológicos depende das propriedades ópticas dos tecidos, e tais propriedades podem variar de indivíduo para indivíduo e de tecido para tecido, o que dificulta o estabelecimento de uma dosimetria. (1) Neste contexto, torna-se primordial pesquisas voltadas para o desenvolvimento de métodos que sejam capazes de determinar a distribuição espacial da luz nos tecidos biológicos de maneira individualizada, permitindo assim a individualização também da dosimetria. Este projeto tem por objetivo utilizar a refletância difusa emitida pelos tecidos biológicos para inferir a distribuição espacial da luz, buscando a possibilidade de prever a existência de heterogeneidades no tecido que possam comprometer a propagação da luz em seu interior. A presença de heterogeneidades pode representar obstáculos à propagação da luz no tecido de modo que a dose de luz entregue ao tecido alvo seja inadequada para determinado fim terapêutico. Medidas de refletância difusa serão realizadas na superfície de *phantoms* ópticos (material capaz de simular as propriedades ópticas dos tecidos biológicos) (2) contendo ou não uma heterogeneidade em seu interior e uma rotina computacional será criada para que seja possível prever a distribuição da luz no interior do *phantom* apenas a partir das medidas em sua superfície. O estabelecimento da técnica proposta permitirá realizar de maneira não-invasiva medidas da propagação de luz nos tecidos biológicos e assim individualizar a dosimetria para cada caso terapêutico de interesse.

Palavras-chave: Refletância difusa. Dosimetria. Fototerapias.

Referências:

- 1 NIEMZ, M. H. **Laser-tissue interactions**: fundamentals and applications. Berlin: Springer, 2004.
- 2 LAI, P.; XU, X.; WANG, L. V. Dependence of optical scattering from Intralipid in gelatin-gel based tissue-mimicking phantoms on mixing temperature and time. **Journal of Biomedical Optics**, v.19, n. 3, p. 35002-1-35002-6, 2014.

PG78

Strain effects on properties of water and ethanol adsorbed on transition metal substrates

FREIRE, R. L. H.¹; TERESHCHUK, P.²; KIEJNA, A.³; SILVA, J. L. F.²

freire.rafaelheleno@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

³Institute of Experimental Physics - University of Wrocław

The adsorption of water and ethanol on transition metals (TM) surfaces is very interesting in view of the steam reforming process for hydrogen production for fuel cell applications. This work is aimed to obtain an understanding of the effects of surface strain (1) on the adsorption properties of water and ethanol. We investigated structural and energetic properties of given molecules on Cu(111), Pt(111), Au(111), $X_n/Pt_nX_{9-n}/X(111)$ and $Pt_n/X(111)$ ($X = Cu$ and Au , $n = 5$ and 9). Our calculations are based on spin-polarized Density Functional Theory within the generalized gradient approximation as proposed by Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) for the exchange-correlation functional. To improve the description of our systems we employed van der Waals correction proposed by Tkachenko and Scheffler. (2) As found before (3), alcohol molecules adsorb on TM systems through the oxygen atom on on-top sites nearly parallel to the surface. It is well known that the reactivity of a metal surface can be manipulated by depositing layers of another metal which induce some strain in the system. The effect of strain on the surface reactivity was investigated employing the d -band model. We found that Pt monolayers and submonolayers on TM surfaces affect the molecule adsorption energy. For example, we found that the Pt monolayer on Au(111) increases the adsorption energy of water and ethanol by about 3 and 3.2 times, respectively, compared to clean Au(111). However, for the Pt submonolayer the adsorption energy increases only by 1.2 and 1.3 times, compared to clean Au(111) (e.g., adsorption energies for water on Au(111) and Pt/Au(111) are -0.11 and -0.31 eV, respectively). Thus, a deep understanding of adsorption of alcohols on different TM surfaces contributes to the design of new catalysts and facilitates and/or accelerates the achievement of new technologies.

Keywords: Adsorption. Surfaces. Density functional theory.

Referências:

1 FREIRE, R. L. H.; KIEJNA, A.; SILVA, J. L. F. Adsorption of Rh, Pd, Ir, and Pt on the Au(111) and Cu(111) surfaces: a density function theory investigation. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 118, n. 33, p. 19051-19061, 2014.

2 TKATCHENKO, A.; SCHEFFLER, M. Accurate molecular van der Waals interactions from ground-state electron density and free-atom reference data. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 7, p. 073005-1

-073005-4, 2009.

3 TERESHCHUK, P.; SILVA, J. L. F. Ethanol and water adsorption on close-packed 3d, 4d, and 5d transition-metal surfaces: a density functional theory investigation with van der Waals correction. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 116, n. 46, p. 24695-24705, 2012.

PG79

Formação de vórtices em um condensado de Bose-Einstein

FRITSCH, A. R.¹; TAVARES, P. E. S.¹; BAHRAMI, A.¹; TONIN, Y. R.²; TELLES, G. D.¹; HENN, E. A. L.¹; BAGNATO, V. S.¹

amilson.fis@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Utilizando campo magnético oscilante para excitar um condensado de Bose Einstein de ^{87}Rb nosso grupo observou a formação de vórtices (1), turbulência (2), e também fragmentação do condensado. (3) A nuvem turbulenta apresenta propriedades diferentes do condensado não perturbado, uma delas é a não inversão do *aspect ratio* (razão entre os raios da nuvem) com a evolução em tempo de voo. Para fornecer os átomos do condensado utilizamos a configuração de duplo MOT (*magneto optical trap*), a primeira célula contém a fonte de átomos e não permite estabelecermos o vácuo necessário para a obtenção do condensado. Estes átomos são empurrados por um feixe de luz ressonante para uma segunda célula, onde fazemos o resfriamento evaporativo em uma armadilha do tipo QUIC e obtemos uma amostra condensada com cerca de $1.8 \cdot 10^5$ átomos. Após atingirmos a condensação, um par de bobinas é utilizado para produzir um campo magnético oscilante, o qual chamamos de excitação. Em nossos estudos atuais, aplicando excitação conseguimos produzir condensados que não apresentam a inversão do *aspect ratio*. Utilizando mecanismos que permitem alterar o *Bias* do confinamento magnético conseguimos produzir vórtices dentro do condensado. Com esta técnica a produção de um único vórtice dentro do condensado já é feita de forma bastante controlada, no entanto, quando estamos produzindo dois ou mais vórtices o número de vórtices ainda se apresenta de forma aleatória. Nosso objetivo atual consiste em estudar formas de controlar experimentalmente o número de vórtices produzido e estudar sua evolução com um possível decaimento dos vórtices para um regime turbulento.

Palavras-chave: Vórtices. Turbulência. Condensados de Bose-Einstein.

Referências:

1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; RAMOS, E. R. F.; CARACANHAS, M. A.; CASTILHO, P.; OLÍMPIO, E. P.; ROATI, G.; MAGALHÃES, D. V.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n. 4, p. 043618-1-043618-5, 2009.

2 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301-1-045301-4, 2009.

3 SEMAN, J. A.; HENN, E. A. L.; SHIOZAKI, R. F.; ROATI, G.; POVEDA-CUEVAS, F. J.; MAGALHÃES,



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

K. M. F.; YUKALOV, V. I.; TSUBOTA, M.; KOBAYASHI, M.; KASAMATSU, K.; BAGNATO, V. S. Route to turbulence in a trapped Bose-Einstein condensate. **Laser Physics Letters**, v. 8, n. 9, p. 691-696, 2011.

PG80

On the phase transition of the one-dimensional Heisenberg spin-1/2 chain under correlated disorder

GETELINA, J. C. A.¹; HOYOS NETO, J. A.¹

jc_getelina@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The quantum critical point is a single dot in the phase diagram of a given system where a continuous phase transition occur with total absence of thermal fluctuations. Close to criticality the behavior of relevant physical observables are governed by specific laws, regulated by the so-called critical exponents, which are believed to be universal. The main objective of phase transition studies is to compute those exponents and consequently define the correspondent universality class for a given model. For the isotropic one-dimensional Heisenberg spin-1/2 chain, which is exactly solvable, this work has already been done. (1) But here we are interested on the anisotropic version of this model, i.e. a chain with impurities or defects represented by quenched disorder. Furthermore, previous investigations show that the introduction of local correlation between the random couplings produces some new exotic properties. (2) In this scenario, by numerically solving this model, we calculate the z and x-component of the disorder averaged correlation function, as well as some interesting thermodynamical quantities, at and near the critical point and extract the correspondent critical exponents, plotted as a function of the disorder strength. Our results are compared to the isotropic and uncorrelated random chains and will also be conflicted with a future renormalization group study.

Keywords: Phase transitions. Disordered systems. Spin chains.

Referências:

1 LIEB, E.; SCHULTZ, T.; MATTIS, D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. **Annals of Physics**, v. 16, n. 3, p. 407-466, 1961.

2 HOYOS, J. A.; LAFLORENCIE, N.; VIEIRA, A. P.; VOJTA, T. Protecting clean critical points by local disorder correlations. **Europhysics Letters**, v. 93, n. 3, p. 30004-p1-30004-p5, 2011.

PG81

Caracterização funcional e estrutural da beta-galactosidase de *Bifidobacterium bifidum* e seus mutantes

GODOY, A. S.¹; CAMILLO, C. M.¹; POLIKARPOV, I.¹

andregodoy@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As beta-galactosidases são dissacaridases capazes de realizar a reação de hidrólise das ligações beta 1-4 de um galactosídeo, tendo a lactose como principal substrato natural. Essas enzimas são amplamente utilizadas na ciência e na indústria, tendo um alto potencial biotecnológico. (1) Além das propriedades hidrolíticas, as beta-galactosidases possuem a característica de sintetizar açúcares complexos chamado galactooligossacarídeos, que são frequentemente comercializados como prebióticos. A beta-galactosidase de *Bifidobacterium bifidum* foi resolvida pela técnica de single anomalous diffraction. Sua estrutura revelou um trímero em forma de barril, em que foi possível observar interações entre resíduos do sítio ativo e a galactose. Além disso, realizamos a caracterização bioquímica e cinética da enzima nativa e de mutantes pontuais. O mutante N160A manteve a afinidade pelo substrato, porém teve uma diminuição de cerca de 100 vezes na constante catalítica da enzima. Já os mutantes H371F e Y289F demonstraram uma diminuição na afinidade pelo substrato, o que sugere que esses resíduos estejam envolvidos na alocação do substrato para o sítio. Os mutantes relativos aos ácidos glutâmicos da enzima não apresentaram atividade, sugerindo que eles são fundamentais para a reação. Essas informações nos permitiram melhor compreender a função de cada resíduo para a atividade dessas enzimas.

Palavras-chave: Beta-galactosidase. Difração de raio-x. *Bifidobacterium*.

Referências:

1 HUBER, R. E.; KURZ, G.; WALLENFELS, K. A quantitation of the factors which affect the hydrolase and transgalactosylase activities of beta-galactosidase (*E. coli*) on lactose . **Biochemistry**, v.15, n. 9, p. 1994-2001, 1976.

PG82

Desenvolvimento de uma microscopia óptica não linear por rotação da polarização elíptica

GOMES, J. A. C.¹; MISOGUTI, L.¹

jorge_coura@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O uso de processos ópticos não lineares tem permitido, em microscopia, a obtenção de imagens tridimensionais de estrutura complexa com diferentes contrastes, enquanto uns dão mais informação a respeito de interfaces, como a geração de terceiro harmônico, outros dão ideia de volume, como fluorescência induzida por absorção de dois fótons. A visualização tridimensional é sem dúvida um grande avanço para estudar sistemas complexos e multi-estruturados como são os casos de espécies/organismos biológicos. Neste sentido, o desenvolvimento da microscopia confocal foi um passo muito importante, (1) que se baseia na capacidade de resolução de profundidade da técnica confocal. Recentemente foi colocada em prática uma nova técnica para a determinação da não linearidade de determinados materiais de maneira simples e precisa, é a rotação não linear da polarização elíptica (RNLPE) com o uso de um amplificador sensível à fase. Nesse estudo, temos a intenção de desenvolver uma nova microscopia óptica não linear por RNLPE usando pulsos intensos de laser, especialmente aqueles de pulso ultracurtos de femtossegundos(fs), para a implementação e aperfeiçoamento de um microscópio por medida da RNLPE, e determinação de imagens tridimensionais usando a técnica de RNLPE. A técnica de RNLPE tem a capacidade de produzir imagens de volume em que o contraste da imagem é dado pela não linearidade refrativa local do meio. Foi feito um estudo preliminar de algumas amostras para demonstrar a viabilidade da metodologia proposta. Utilizamos cubetas preenchidas com diferente solventes como amostras de teste em que foi possível discriminar a parede da cubeta feita de sílica e o solvente interno, utilizando um feixe de laser fortemente focalizado. Neste caso, a resolução espacial é determinada pelo comprimento confocal e pela cintura do feixe. A sílica com não linearidade eletrônica pura (com pulsos ultracurtos (fs)) e os solventes líquidos com não linearidade grandes oriundos de efeitos eletrônicos e orientacionais. (2)

Palavras-chave: Rotação não linear. Microscopia . Tridimensional.

Referências:

1 MASTERS, B. R. Confocal microscopy and multiphoton excitation microscopy: the genesis of live cell imaging. Bellingham: SPIE, 2005.

2 BOYD, R. W. **Nonlinear optics**. San Diego: Academic Press, 1992.

PG83

Simulação da equação de Dirac em eletrodinâmica quântica de cavidades (EQC)

GOMEZ, E. C.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

eliceocortes@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As simulações de efeitos quânticos relativísticos têm recebido apreciável atenção nos últimos anos. Recentemente simulou-se a equação de Dirac 1+1 D no contexto de armadilhas iônicas (1), usando um sistema constituído de um único íon de massa M dentro de uma armadilha do tipo Paul (2), onde o íon na armadilha comporta-se como uma partícula relativística livre. Neste modelo, o momento e a posição da partícula relativística correspondem às quadraturas do campo eletromagnético da armadilha. Então, uma vez que se tenha informação do valor esperado da quadratura da posição, podemos estudar efeitos relativísticos associados a ela, como por exemplo o Zitterbewegung. (3) Motivado pelos trabalhos mencionados acima, neste trabalho demonstraremos como simular o hamiltoniano de Dirac 1+1 D e 2+1 D para uma partícula relativística livre via Eletrodinâmica Quântica de Cavidades. Obtemos o Hamiltoniano associado a Dirac 1+1D, onde usamos um sistema atômico interagindo dispersivamente com um modo da cavidade e campos clássico. Em seguida, analisamos o efeito relativístico (Zitterbewegung) neste contexto e discutimos uma forma de simulá-lo.

Palavras-chave: Equação de Dirac. Zitterbewegung. Eletrodinâmica quântica de cavidades.

Referências:

- 1 GERRITSMA, R. et al. Quantum simulation of the Dirac equation. **Nature**, v. 463, n. 7277, p. 68-72, 2010.
- 2 LAMATA, L. et al. Dirac equation and quantum relativistic effects in a single trapped ion. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 25, p. 253005-1-253005-4, 2007.
- 3 GREINER, W. **Relativistic quantum mechanics**. Berlin: Springer-Verlag, 1994. 345 p.

PG84

Rastreamento de linfonodo sentinela através de técnicas de fluorescência óptica com o uso de indocianina verde

GOVONE, A. B.¹; GARCÍA, P. G.¹; KURACHI, C.¹

govone.angelo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A utilização de imagens por fluorescência é muito comum em exames de diagnóstico médico por trazer benefícios que incluem alto contraste e alta sensibilidade. Tais benefícios podem ser empregados para realizar o mapeamento do linfonodo sentinela. (1) A localização do linfonodo sentinela (LS) se mostra importante por possibilitar determinar o comprometimento linfonodal e consequente aumento da detecção de metástases. O LS é comumente identificado durante uma cirurgia através de contrastes vitais ou radiofármacos injetados no tumor e detectados a seguir pelo detector de radiação (probe). O presente trabalho tem por objetivo desenvolver um sistema capaz de localizar LS através da fluorescência de indocianina verde (ICG). A ICG é um contraste amplamente utilizado já há muitos anos em exames de imagem, tais como a Angiografia, e também permite a localização de LS em cirurgia oncológica. Tal aplicação permite a detecção e avaliação do LS, guiando um possível esvaziamento ganglionar da cadeia linfonodal da qual ele se refere, caso este se faça necessário. O espectro de absorção ocorre na faixa de 780nm e fluorescência na faixa de 850nm. O equipamento desenvolvido conta com 16 diodos LASER de 780nm e 90mW cada, o sistema LASER foi disposto de forma a obter uma projeção homogênea sobre o paciente. A fonte de alimentação destes diodos foi projetada e desenvolvida pelo Laboratório de Instrumentação Óptica e Eletrônica (LIEPO). A irradiação emitida pela fluorescência da indocianina é capturada por um conjunto composto por um espelho dicróico e duas câmeras Thorlabs. As câmeras recebem a imagem proveniente do espelho, que separa o espectro visível do infravermelho (resultante da fluorescência da ICG). A câmera que recebe o espectro infravermelho conta com um filtro passa alta, permitindo apenas a aquisição de imagem proveniente da fluorescência, reduzindo possíveis interferências por reflexão do LASER. A aquisição de imagens ocorre utilizando um algoritmo desenvolvido na plataforma LabView, que realiza filtragem da imagem de infravermelho e sobreposição da imagem do espectro visível, possibilitando assim a visualização, em tempo real, do tecido estudado e da fluorescência subcutânea. O protótipo encontra-se em fase de finalização, com testes de calibração em fantoma. Esse trabalho é desenvolvido em colaboração com o Dr. André Carvalho do Hospital do Câncer de Barretos, onde pretende-se realizar os primeiros testes em animais. O projeto conta com apoio da FAPESP, Capes e CNPq.

Palavras-chave: Indocianina verde. Linfonodo sentinela. Laser.

Referências:

1 KITAI, T; INOMOTO, T.; MIWA, M.; SHIKAYAMA, T. Fluorescence navigation with indocyanine green for detecting sentinel lymph nodes in breast cancer. **Breast Cancer**, v. 12, n. 3, p. 211-215, July 2005.

PG85

A simple model for electrocommunication: “refractoriness avoidance response”

GUARIENTO, R. T.¹; MOSQUEIRO, T. S.¹; ALVES, A. B.¹; CAPUTI, A. A.²; PINTO, R. D.¹

rafael.tuma.guariento@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable - Montevideo

Weakly field electric fishes have an electric sense with two simultaneously processed tasks, called electrolocation and electrocommunication. (1) In pulse-type electric fishes, the first task is perceived by deformations of the self-generated electric field (2), and the later one by the precise timestamp of its own pulses and those generated by its conspecifics. Some observed changes in the timestamps of two communicating fish are different from those observed during the so called “Jamming Avoidance Response” of wave-type electric fishes. (3) Although in some fish there actually is a rate separation mechanism (coincidence avoidance), in most fish these rate changes are only transient (3) and has been reproduced using recursive models. However it is well known that the electrosensory path of the fish is stimulated by the discharge of its conspecifics during the interval between two self-generated discharges (stimulus phase). Moreover, second order neurons responsible for the fish’s self-detection show very long refractory period of about 10ms due to the activation of a low threshold K⁺ conductance. This has led to hypothesis that there is not a coincidence avoidance effect, but instead an attempt to avoid firing just after its conspecific. Thus, a fish sensory processed signal is not jammed by a conspecific signal. Agreeing with that, there is evidence that the fish adjusts its own signal to make the other one fire at a “preferential” phase, and this is probably related to dominance. (3) These effects can be observed in an integrate-and-fire model with non-linear inputs taking into account a phase preference for eliciting acceleration. As the refractoriness of the fast electrosensory path is the most important jamming effect we call this effect “electrosensory refractoriness avoidance response” (RAR). Here, we extend this idea and test it using a simplified model that take this effects into account. We propose a model with two integrate-and-fire neurons per fish and a non-linear feedback loop between them. The first neuron represents the fish’s pulse, and the other one a “sensory neuron”. The feedback is non-linear and has the effect of increase the frequency of firing. This model has been implemented both in an electronic hardware and in a computer simulation and allows us using it to mimic a conspecific during electro-communication encounters with real fish.

Keywords: Electric fish. Jamming avoidance response. Electrocommunication.

Referências:

- 1 DECOURSEY, P. J. **Sensory perception and communication in electric fish**. Columbia, SC: University of South Carolina; 1993.
- 2 PEREIRA, A. C.; CAPUTI, A. A. Imaging in electrosensory systems. **Interdisciplinary Sciences**

Computational Life Sciences, v. 2, n. 4, p. 291-307, 2010.

3 WESTBY, G. W. M. Electrical communication and jamming avoidance between resting *Gymnotus carapo*. **Behavioral Ecology and Sociobiology**, v. 4, n. 4, p. 381-393, 1979.

PG86

Estudos funcionais da CrNIP7 de *Chlamydomonas reinhardtii*: uma proteína envolvida na biogênese de ribossomo

GUTIERREZ, R. F.¹; AVACA-CRUSCA, J. S.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹

raissa.fgutierrez@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A biogênese de ribossomo é um processo complexo e altamente regulado, em que um transcrito primário é processado para formar RNAs ribossomais maduros. (1,3) Este processo é melhor caracterizado em levedura e, curiosamente vários fatores que foram descritos pela primeira vez em *Saccharomyces cerevisiae* mostraram ter funções diferentes em humano. (1,3) Um desses fatores divergentes é NIP7, uma proteína altamente conservada e codificada pelo gene essencial *nip7* de cópia única. NIP7 tem um domínio de ligação a RNA e atua na formação das subunidades ribossomais 60S e 40S em levedura e humano, respectivamente. (1,3) Para avançar nossa compreensão da biogênese do ribossomo em outros modelos de eucariotos, realizamos uma análise funcional da ortóloga de NIP7 da alga *Chlamydomonas reinhardtii*, um organismo ancestral a plantas. (2) Neste contexto, o gene *CrNip7* foi amplificado por PCR a partir do cDNA total de *C. reinhardtii* e subclonada em plasmídeos para ensaios de complementação funcional, utilizando três linhagens diferentes de *S. cerevisiae*. Os nossos resultados revelaram que CrNIP7 complementa a função de Nip7p de levedura, uma vez que a expressão de CrNIP7 em uma linhagem mutante sensível à temperatura (DG130) e em outra linhagem com *nip7* deletada do genoma (DG442) recuperou o crescimento de ambas linhagens, de forma semelhante à linhagem de controle positivo (DG440). Ademais, foi realizado ensaio de duplo híbrido a fim de identificar potenciais parceiros proteicos de interação de CrNIP7. Alguns parceiros em potencial foram identificados, incluindo uma proteína com um domínio G-patch, descrito em proteínas que também estão envolvidas na síntese de ribossomo. Estas interações encontradas pelo ensaio de duplo híbrido estão em fase de validação. Tomados em conjunto, nossos resultados contribuirão para esclarecer o papel exercido pela proteína CrNIP7 na biogênese de ribossomo em *Chlamydomonas reinhardtii* em comparação com outros modelos eucarióticos.

Palavras-chave: *Chlamydomonas reinhardtii*. Biogênese de ribossomo. Complementação funcional.

Referências:

- 1 MORELLO, L. G.; HESLING, C.; COLTRI, P. P.; CASTILHO, B. A.; RIMOKH, R.; ZANCHIN, N. I. T. The NIP7 protein is required for accurate pre-rRNA processing in human cells. **Nucleic Acids Research**, v. 39, n. 2, p. 648-665, 2011.
- 2 MERCHANT, S. S. et al. The *Chlamydomonas* genome reveals the evolution of key animal and plant function. **Science**, v. 318, n. 5848, p. 245-250, 2007.
- 3 ZANCHIN, N. I. T.; ROBERTS, P.; DESILVA, A.; SHERMAN, F.; GOLDFARB, D. S. *Saccharomyces*



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

cerevisiae Nip7p is required for efficient 60S ribosome subunit biogenesis. **Molecular and Cellular Biology**, v. 17, n.9, p. 5001-5015, 1997.

PG87

Optical connection of polymeric microstructures by nanofibers

HENRIQUE, F. R.¹; MENDONÇA, C. R.¹

francielerenata@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Fabrication of three-dimensional microstructures is a promising field due to its high applicability in microfluidics, microelectronics, photonics, biology, etc. Two-photon polymerization is a convenient way to produce microstructures as it is a single step process. Furthermore, the nonlinear nature of the two-photon polymerization provides high resolution to the technique. The connection between microstructures is an important tool to the development of photonic circuits. This work aims to demonstrate the viability of the optical connection between polymeric microstructures by sub-micrometric optical fibers (fiber tapers/nanofibers). Fluorescent polymeric microstructures, doped with Rhodamine B, will be produced by means of two-photon polymerization. The resin is polymerized by 80 fs pulses at 780 nm from a Ti:sapphire laser oscillator. A step motor moves the sample in the z axis, while two galvanometric mirrors scan the laser beam in the x-y plane. Sub-micrometric optical fibers are produced by a heat-and-draw approach, in which a butane torch heats a conventional single mode optical fiber while a translation stage stretches it symmetrically. In order to connect the microstructures to the nanofibers two methods will be used: (i) direct contact between the microstructures and the tip of the nanofibers through micromanipulators and (ii) construction of microstructures connected to the nanofibers. Once the connections are done, light will be coupled to the nanofibers with the purpose of verifying the optical connection between the microstructures. Initially a systematic investigation of the fiber tapering process has been carried out. After assembling the conventional system to obtain the nanofibers, a travelling burner system, in order to scan the flame along the fiber, was incorporated to the experimental setup. The features of fiber tapers produced with standing flame and travelling flame, characterized by Scanning Electron Microscopy (SEM), were compared. The influence of parameters such as stretching length and velocity, flame intensity and flame scanning velocity were studied. We have been able to determine the ideal conditions to produce tapers with diameter around 1 μm and homogeneous waist that will be employed for the optical connection of microstructures. The authors would like to acknowledge FAPESP for the financial support.

Keywords: Multiphoton processes. Microstructures fabrication. Optical fibers tapering.

Referências:

1 MARUO, S.; FOURKAS, J. T. Recent progress in multiphoton microfabrication. **Laser & Photonics Reviews**, v. 2, n. 1-2, p. 100-111, 2008.

2 XUE, S. et al. Theoretical, numerical, and experimental analysis of optical fiber tapering. **Journal of Lightwave Technology**, v. 25, n. 5, p. 1169-1176, 2007.

PG88

Properties that arise from a depth-zoom analysis of the logistic map

JUSTO, M. J. M.¹; BRUNO, O. M.¹

machicao@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Chaotic nonlinear dynamical systems have been widely applied in many domains of science, including Cryptography, which has obtained significant results mainly because of the sensitivity to initial conditions, ergodicity, and mixing properties that assure a high-quality pseudo-randomness, when looking for an efficient encryption that can be achieved throughout a proper construction. Should be noticed that many researchers related to chaos theory employ computational implementations based on floating-point arithmetic, where every real number is an approximation. Thus, in a long-time, the expected trajectory may be away from the theoretical one, as a result of limited machine precision (discretization and truncation errors). (1) We focused on one particular case of "failure" cryptographic algorithm based on the logistic map $x^{t+1} = \mu x^t(1 - x^t)$ with interval (0,1), one of the most studied dynamical system and one of the firsts cryptosystems based on chaos. From a cryptographic viewpoint, this latter approach has been severely criticized (2-3), based on two points that may indicate insufficient pseudo-randomness: (i) Its probability distribution exhibits a "U" pattern, where is expected a plateau distribution as much as possible (2); and (ii) Trajectories of short cycle length where is expected longer periodicity depending on machine limitations. (3) However, these arguments were based on a finite precision criteria (single- and double-precision) that may be underestimating the logistic map potential. This work focused in these two points of "failure" of the logistic map. This work explored each x^t number of a trajectory, in a depth-zoom manner, by using high-precision floating point arithmetic. This means, to discard the k -th digit to the left of the decimal separator in order to compound a specific x_k^t number. It is found that, in this proposed manner, an interesting phenomena appears. The generated sequences are not only more accurate, instead, it can be observed a rapid improvement of its probability distribution, achieving a more plateau distribution, and also an increase of the cycle lengths. Certainly, a profound analysis under this proposed manner is still needed, e.g., the bifurcation diagram, the phase diagram, the cobweb diagram, the Lyapunov exponents, cycles-length analysis, among others. From this first exploration can be observed some "folding and stretching" pattern of the x_k -th numbers on phase-space, which cannot be observed when traditional floating point arithmetic is used. Notwithstanding more analysis are still needed, these results may represent an interesting impact to chaos theory and cryptography, since this approach could be generalized to other discrete dynamical systems and consequently it may represent a chaotic-based encryption algorithm improvement.

Keywords: Logistic map. High-precision floating point. Cryptography.

Referências:

1 CORLESS, R. M. . What good are numerical simulations of chaotic dynamical systems?. **Computer**

& Mathematics with Applications, v. 28, n.10-12, p. 107-121, 1994.

2 ALVAREZ, G. et al. Cryptanalysis of an ergodic chaotic cipher. **Physical Letters A**, v. 311, n. 2-3, p. 172-179, 2003.

3 PERSOHN, K. J. ; POVINELLI, R. J. . Analyzing logistic map pseudorandom number generators for periodicity induced by finite precision floating-point representation. **Chaos, Solitons & Fractals**, v. 45, n. 3, p. 238-245, 2012.

PG89

Estudo de diferentes técnicas ópticas para o diagnóstico de doenças na lavoura de soja

KUBOTA, T. M. K.¹; MAGALHÃES, A. B.²; VILLAS, P. R.²; MILORI, D. M. B. P.²

thiagomassaiti.k.k@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²EMBRAPA - CNPDIA

O setor da agroindústria contribui decisivamente para que o Brasil se consolide como um dos maiores produtores de alimento do mundo. O setor representa 20% do PIB nacional e 32 % das exportações. E uma das culturas de grande importância é a soja, onde o país é o segundo na exportação mundial, dominando 35% do mercado internacional, de acordo com dados de 2011 do Ministério da Agricultura. Ela é uma cultura de fácil cultivo e seus rendimentos podem chegar a 4000kg/há. Mas a presença de pragas e doenças podem prejudicar a qualidade e a quantidade da produção de soja. O manejo sendo realizado de forma incorreta, e o cultivo de uma só cultura, podem aumentar a chance do aparecimento de doenças. Para a soja existe cerca de 40 doenças causadas por fungos, bactérias e vírus identificados no Brasil. (1) Para evitar grandes prejuízos é extremamente importante descobrir qual doença está atacando a plantação e com isso escolher qual a melhor forma de manejo a ser adotado. Por esse motivo é importante termos uma técnica para realizar o diagnóstico, e se possível de forma precoce, para que assim o problema seja atacado o mais rápido possível. Esta técnica necessita ser de baixo custo, precisa e com pouco preparo de amostras. Este trabalho tem o objetivo principal, utilizando técnicas fotônicas, desenvolver um equipamento portátil, para que possa ser lavado a campo e ser usado como ferramenta no controle de doenças na cultura de soja. Inicialmente vamos atacar duas doenças que afligem a cultura da soja. A primeira vai ser a ferrugem asiática que se tornou um dos problemas mais relevantes nas lavouras brasileiras e de vários países da América do sul. A ferrugem asiática pode registrar perdas de 30 a 90 % da plantação contabilizando até U\$ 2 bilhões de prejuízos. (2) E o segundo problema é a soja louca II que diminui a produtividade da planta, pois leva ao abortamento das flores e vagens. A queda da produção pode ser de até 40%. A priori serão utilizadas técnicas de espectroscopia de fluorescência e imagens de fluorescência. (3) Junto com os dados adquiridos com essas técnicas, serão utilizadas ferramentas estatísticas como a Análise de Componentes Principais (PCA) e Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLSR) para se criar modelos, e com eles realizar os diagnósticos das plantas.

Palavras-chave: Diagnóstico. Técnicas ópticas. Doenças de soja .

Referências:

1 MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E ABASTECIMENTO. Secretaria de Política Agrícola. **Plano agrícola e pecuário 2012/2013**. Brasília, DF, 2012. 133 p. Disponível em: <http://www.agricultura.gov.br/arq_editor/file/Politica_Agricola/Plano%20Agr%C3%ADcola%202012-2013/PAP2012-2013_livroWEB%20-%20Atualizado.pdf>. Acesso em: 4 jul. 2013.

2 FURLAN, S. H. Impacto, diagnose e manejo da ferrugem asiática da soja no Brasil. In: REUNIÃO ITINERANTE DE FITOSSANIDADE DO INSTITUTO BIOLÓGICO, 11., 2005, Aguaí. **Anais ...** São Paulo: Instituto Biológico, 2005. p. 31-32.

3 PEREIRA, F. M. V.; MILORI, D. M. B. P.; PEREIRA FILHO, E. R.; VENÂNCIO, A. L.; RUSSO, M. S. T.; CARDINALI, M. B.; MARTINS, P. K.; ASTUA, J. F. Laser-induced fluorescence imaging method to monitor citrus greening disease. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 79, n. 12, p. 90-93, 2011.

PG90

Structure-function correlation and conformational changes in the NTS1 C-terminal region and in the human Galectin-4

KUMAGAI, P. S.¹; NONATO, M. C.²; BARUFFI, M. D.²; WATTS, A.³; COSTA FILHO, A. J. da⁴

patriciasuemy@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto - USP

³University of Oxford

⁴Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

In this part of the project, we studied two systems: structural features of an integral membrane protein and the carbohydrate interaction properties of a galectin. The first protein is the neurotensin receptor 1 (NTS1), a G-protein-coupled receptor that is an important membrane protein involved in several cell signalling processes and that has a huge pharmacological relevance due to their role in drug targeting. (1) NTS1 is a subject of study of the Prof. Anthony Watts group (University of Oxford) and was performed as collaboration during a one-year stay in his group. More specifically, we are interested in the conformation of the C-terminal region, which is predicted to form a helix, and for which there is no X-ray data available. The second problem of interest involves the interactions of human galectin-4 (HGal-4) and its natural ligands. In this case, we are seeking for new information to clarify the mechanism of galectin interaction with carbohydrates and glycolipids. The main technique used was Electron Spin Resonance (ESR) and Microscale thermophoresis (MST), a new method to quantify bimolecular interaction such as ligand-protein binding constant. Synchrotron Radiation Circular Dichroism (SRCD) measurements was performed as well in collaboration with Prof. Bonnie Wallace (University of London). This experiment will come up with some information regarding protein structural changes in the presence of ligands and will complement the results obtained until now. We performed site directed mutagenesis of 11 residues in the helix H8 of NTS1, where the native residue was replaced by a cysteine, which was, in turn, spin labelled for ESR experiments. The inverse of the line width of the central resonance of the spin labelled ESR spectrum was used as a measure of the dynamics and structure of helix H8. The behaviour of that parameter clearly showed a 3.6 periodicity, which is compatible with an *alpha*-helical structure. To the best of our knowledge this the first time that such information is obtained since the crystal structures reported so far did not present electron density for the region H8. As for the HGal-4, we were able for the first time to obtain data on the binding constants between the protein and two types of *beta*-galactoside carbohydrates (lactose and N-Acetyl-Lactosamine). The binding constant of HGal-4 to lactose was $K_D = 11$ mM and to LacNAc was $K_D = 0.9$ mM. The MST results are in good agreement with previous studies for other galectins (range of mM, (2), and, most importantly, our results show that the HGal-4 affinity for large carbohydrates is much higher than for small ones. SRCD has been shown as an efficient and more accurate technique for analyses of *beta*-sheet secondary structure, where there is a slow but significant decrease in the region from 175 to 208 nm. Thus, this project has been extending

our knowledge to new techniques (MST and SRCD) as well as allowing us to work on applications of ESR to a new biological system (integral membrane proteins).

Keywords: HGal-4. NTS1. Interaction.

Referências:

1 VENKATAKRISHNAN, A.J., et al. Molecular signatures of G-protein-coupled receptors. **Nature** , v. 494, n. 7436, p.185-194. 2013.

2 ODA, Y., et al. Soluble lactose-binding Lectin from rat intestine with two different carbohydrate-binding domains an the same peptide chain. **Journal of Biological Chemistry** , v. 268, n. 8, p. 5929-5939,1993.

PG91

Análise da interação não-canônica entre septinas: SEPT3 e septinas do grupo II

LANZONI, P.¹; GARRATT, R. C.¹

paola_lanzoni@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As septinas são proteínas filamentosas que possuem sítio de ligação GTP-GDP e estão presentes no citoesqueleto das células eucarióticas. Este grupo de proteínas foi inicialmente identificado como participantes do ciclo de divisão celular de leveduras, mas posteriormente foi identificado em organismos mais complexos como platelmintos, animais superiores, insetos e recentemente em algas. Em humanos, estas proteínas estão relacionadas a diversos tipos de doenças figurando entre elas o câncer, doenças degenerativas, e até infertilidade em homens. Os primeiros estudos estruturais foram feitos por Sirajuddin e colegas (1) quando se conseguiu resolver a primeira estrutura de um filamento de septinas de humanos formado por SEPT2 (do grupo III), SEPT6 (do grupo II) e SEPT7 (grupo IV). Este trímero já havia sido identificado por Kinoshita (2) a partir de estudos de imunoprecipitação em células HeLa. Baseando-se na homologia das septinas e na estrutura de filamento fisiológico encontrado, Kinoshita propôs regras para a formação canônica de filamentos de septinas, em que trímeros se formariam de acordo com SEPT2/6/7, onde SEPT2 ou a SEPT6 poderiam ser trocadas por outra septina do mesmo grupo enquanto SEPT7 não poderia ser trocada, tornando-a única e indispensável para a formação dos filamentos. A validade desta regra foi verificada em experimentos realizados de duplo- e triplo-híbrido (3), onde trímeros diferentes que respeitam esta regra foram detectados. Porém, além destes, também foram identificadas interações não propostas por Kinoshita (aquí chamadas de "não-canônicas"). Algumas interações não-canônicas são formadas por septinas do grupo I (SEPT3, SEPT9 e SEPT12) que interagem com septinas do grupo II (SEPT6, SEPT8, SEPT10, SEPT11 e SEPT14) pela sua interface G, o que levou a proposta de que septinas do grupo I possam se posicionar no lugar das septinas do grupo III no filamento descrito por Sirajuddin et al. O objetivo deste trabalho de mestrado está em descrever biofisicamente e estruturalmente a interação entre septinas do grupo I e septinas do grupo II através de sua interface G, mais especificamente, analisar se SEPT3, uma septina do grupo I, ocupa o lugar de SEPT2 no filamento canônico, ampliando o entendimento da montagem destes filamentos. **Materiais e Métodos:** Os genes SEPT3, SEPT6, SEPT8, SEPT10, SEPT11 e SEPT14 serão amplificados e posteriormente clonados em vetor de amplificação pGEM-T e posteriormente será passado para o vetor de expressão bicistrônico pETDuet-1 primeiramente o gene SEPT3 no sítio de clonagem 1 e posteriormente, no sítio de clonagem 2, será inserido os outros genes, formando as duplas SEPT3-SEPT6, SEPT3-SEPT8, SEPT3-SEPT10, SEPT3-SEPT11 e SEPT3-SEPT14. Após a padronização da expressão destas proteínas, a formação de oligômeros será verificada através de sua purificação por cromatografias de afinidade e em seguida por cromatografia de exclusão molecular. A constante de afinidade destes dímeros será medida através de ultracentrifugação analítica, dicróismo circular e ressonância plasmônica de superfície e um ensaio de cristalização será realizado para a determinação da interface de interação das duplas. Este projeto está em fase de implementação e ainda não existem resultados parciais.

Palavras-chave: Septinas. SEPT3. Constante de afinidade.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M.; FARKASOVSKY, M.; HAUER, F.; KÜHLMANN, D.; MACARA, I. G.; WEYAND, M.; STARK, H.; WITTINGHOFER, A. Structural insights into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-317, 2007.

2 KINOSHITA, M. Assembly of mammalian septins. **Journal of Biochemistry**, v. 134, n. 4, p. 491-496, 2003.

3 NAKAHIRA, M. et al. A draft of the human septin interactome. **PLoS One**, v. 5, n. 11, p. e13799-1-e13799-12, 2010.

PG92

História da óptica no século XIX

LAPORTE, R. S.¹; SILVA, C. C.¹

rafael.laporte@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Para se realizar uma pesquisa em História da Ciência é necessário primordialmente selecionar um tema inserido em uma categoria ampla de assuntos e efetuar um estudo para adquirir conhecimento referente ao contexto histórico do período em questão.(1) Uma vez escolhido o assunto, deve-se fazer um levantamento bibliográfico, lendo obras não somente de outros historiadores como também dos artigos e publicações de cientistas relacionados com o tema. Somente após todo este processo inicial pode-se delimitar com maior precisão qual será a linha de pesquisa do trabalho em História da Ciência. Devido ao início recente deste trabalho, esta etapa inicial ainda não foi completamente concluída. Contudo, a temática geral do trabalho já foi estabelecida e refere-se a História da Teoria Ondulatória, com tratamento especial para a Luz, onde poderemos investigar as teorias de Newton, Young, Fresnel entre outros.(2) Através deste estudo, será possível compreender de que maneira as ideias referentes ao tema evoluíram até conduzirem ao modelo atualmente aceito.

Palavras-chave: Ondulatória. Óptica. Luz.

Referências:

1 MARTINS, R. A. **Orientação geral sobre a elaboração de uma dissertação de mestrado em história da ciência.** (versão 1). Disponível em: <<http://ghc.ifci.unicamp.br/download/disserta-1.pdf>>.

2 SILVA, C. C.; MOURA, B. A. Science and society: the case of acceptance of newtonian optics in the eighteenth century. **Science and Education**, v. 21, n. 9, p. 1317-1335, Sept. 2012.

PG93

Photodynamic inactivation of microorganisms which cause pulmonary diseases: presenting a new infrared light source

LEITE, I. S.¹; GERALDE, M. C.²; SALINA, A. C. G.³; MEDEIROS, A. I.³; KURACHI, C.¹; BAGNATO, V. S.¹; INADA, N. M.¹

ilaiali.leite@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Programa de Pós Graduação em Biotecnologia - UFSCar

³Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Araraquara - UNESP

Antibiotics are molecules that can inhibit the growth or kill determined microorganisms. In the first 50 years of the antibiotic era, an estimated one million tons of these drugs have been produced and disseminated. (1) The microbial resistance to antibiotics, as the result to their inappropriate use, is a problem that was initially reported in 1930 and 1940, with the introduction of the first sulfonamides and penicillin into infections treatment. (2) Since then, several bacteria have been identified as resistant to different classes of antibiotics, hindering the conventional treatment of serious diseases. Among these illnesses is pneumonia, the leading cause of children mortality worldwide and a major problem for elderly people and patients with continuous mechanical ventilation. (3) The growing multidrug-resistance of *Streptococcus pneumoniae*, one of the most common bacteria responsible for this infection, reduces the treatment's effectiveness and creates the necessity of developing new approaches. Photodynamic therapy (PDT) is based on the interaction of light with a photoactive substance to produce oxidative damage to cells, and it has been used to treat a wide variety of diseases. We are presenting a new device developed at São Carlos Institute of Physics and specific *in vitro* protocols aiming to evaluate the PDT effectiveness using indocyanine green (ICG) and an infrared light source against *Streptococcus pneumoniae* and the interaction of ICG with alveolar macrophages (AM), an important immune effector cell. Three ICG concentrations (10, 5 and 1 μM) were tested with the bacterial suspension prepared in 96-well plates (containing 10^7 bacteria per well), and after 20 minutes of incubation in the dark, the plates were irradiated. For comparison, two light sources developed by the Technical Support Laboratory (LAT) were used: an 850 nm Biotable and a 780 nm Lasertable, with a final dose of 10 and 20 J/cm^2 for both devices. To evaluate the ICG interaction with the AM, 96-well plates containing 10^5 cells per well were tested following the same PDT parameters. The irradiation was performed with the 780 nm equipment, and the cell viability was obtained indirectly via the MTT method. PDT against *S. pneumoniae* showed that, with the 850 nm equipment, the 10 μM ICG solution had bactericidal effect by itself, while the irradiation of the 5 μM displayed an average of $5\log_{10}$ reduction on the colony-forming units (CFU). Similar results were obtained with the Lasertable. Preliminary studies of ICG interaction with the AM presented difficulties to obtain the cell viability due to the semi-adherent characteristic of this particular cell line, what facilitates the dislodgement of the cells from the plate. New protocols are currently being tested to collect reliable viability data. Further experiments include a co-culture of the bacteria and the immune cell, to determine if the PDT assists the immunological mechanism to fight the infection. Also,

the same protocol will be tested against a pneumonia bacterium that has become a significant global public health challenge, *Klebsiella pneumoniae*.

Keywords: Photodynamic inactivation. Infrared light source. Indocyanine green.

Referências:

1 WALSH, C. **Antibiotics:** actions, origins, resistance. Washington: ASM Press, 2003. 335 p.

2 ALANIS, J. A. Resistance to antibiotics: are we in the post-antibiotic era?. **Archives of Medical Research**, v. 36, n. 6, p. 697-705, 2005.

3 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Pneumonia**. Fact sheet n. 331. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs331/en/>>. Acesso em: 10 dez. 2013.

PG94

Especificidade na interface G do dímero de septinas SEPT5-SEPT8

LEONARDO, D. A.¹; MACEDO, J. N.¹; GARRATT, R. C.¹

dleonardo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Introdução: Septinas são proteínas que apresentam normalmente atividade GTPasica, desempenhando um papel importante na estrutura da célula. A sua expressão ectópica ou envelhecimento inadequado estão associados com diversas patologias incluindo o mal de Alzheimer, doença de Parkinson e diversos tumores. (1) Para realizar suas funções, as septinas formam heterofilamento que são estabilizados por interações entre as subunidades através de dois tipos de interface, chamadas de G e NC. (2) Compreender os mecanismos moleculares exatos que controlam a montagem correta dos filamentos individuais e posteriormente seu empacotamento em estruturas de ordem superior, ou seja, entender a especificidade nas interfaces entre septinas ao longo de um filamento, representa um dos maiores desafios na área de bioquímica de septinas atualmente. O presente trabalho tem como objetivo estudar a interface G do complexo formado entre septina 5 (SEPT5) e septina 8 (SEPT8). **Materiais e Métodos:** Os genes para SEPT5 e SEPT8 foram clonados em vetor de expressão bicistônico pRSFDuet, co-expressadas e co-purificadas por cromatografias de afinidade e exclusão molecular. A expressão das proteínas foi avaliada por SDS-PAGE e confirmada por espectrometria de massas. Além disso, modelo do dímero foi gerado usando modelagem por homologia. **Resultados Parciais:** Na exclusão molecular observa-se que as proteínas purificam como um dímero propriamente (SEPT5-SEPT8) e observando-se sempre um excesso de SEPT8 no final da purificação. No modelo foram identificados os aminoácidos PHE144 da SEPT5 e THR53 da SEPT8 como possíveis resíduos envolvidos numa interação direta e específica na interface G do dímero SEPT5-SEPT8.

Palavras-chave: GTPasas. Proteínas filamentosas. Septinas.

Referências:

- 1 WEIRICH, C. S.; ERZBERGER, J. P.; BARRAL, Y. The septin family of GTPases: architecture and dynamics. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 9, n. 6, p. 478-489, 2008.
- 2 SIRAJUDDIN, M.; FARKASOVSKY, M.; HAUER, F.; KÜHLMANN, D.; MACARA, I. G.; WEYAND, M.; STARK, H.; WITTINGHOFER, A. Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.

PG95

Structural characterization of *Trypanosoma brucei* spliceosomal protein U5-15K

LIMA, A. L.¹; THIEMANN, O. H.¹; SILVA, M. T. A.¹

ana.llima@hotmail.com

¹Instituto de Física da São Carlos - USP

The majority of eukaryotic genes contain exons and introns in their structure. The introns need to be removed in order to form a mature messenger RNA (mRNA), this processing is called splicing and it can happen in two different ways: cis splicing, there is only one mRNA molecule from where the introns are removed, and trans-splicing, that involves the binding of two different transcripts to form the mature mRNA. (1) Trans splicing is a highly conserved biochemical pathway in the parasites from trypanosomatidae family (*Trypanosoma brucei*, *Trypanosoma cruzi*, *Leishmania spp*). For trans splicing occur all mature messengers are initialized by the same 40 nucleotides sequence called splice leader (SL) and require ribonucleoproteins (snRNPs U1, U2, U4/U6 e U5) complexes formed by small RNAs rich in uridine strongly bound to proteins. (2) U515k is a U5 complex specific protein essential to mRNA processing as well as cell viability. (3) The scope of this project is the optimization of *Trypanosoma brucei* s spliceosomal protein U515k expression and purification, as well as trials tracking crystallization conditions, self-cleavage tests and structural characterization. The expression of U5-15k was accomplished using the construction U515k/pETSUMO in *Escherichia coli* (BL21 pLysS). The purification was based on affinity chromatography and the pure protein was used to perform tests in order to verify the self-cleavage as well as its inhibition and and differential scanning fluorimetry (DSF) to optimize the purification buffer. For the structural study the protein solution was submitted to circular dichroism (CD) comparing the secondary structure composition of U515k before and after the cleavage, and small angle x ray scattering (SAXS). Purified U5-15k incubated at room temperature for a period of five days showed a loss of approximately 46 amino acids. The same process was repeated using five potential inhibitors among which DTT was the most efficient. The CD experiments showed a secondary structure composition in agreement with the result predicted by Psipred. The same could not be done with the cleaved protein due to problems with the sample. The DSF experiments showed that U515k have more stability at low concentrations of salt and pH between 6,8 and 7,5. So far it is possible to affirm that *T. brucei* U5-15k presents self-cleavage activity which is inhibited by DTT. More experiments are required to identify the cleavage site such as mass spectrometry and the CD experiments need to be repeated.

Keywords: U5-15K. Trans-splicing. *Trypanosoma brucei*.

Referências:

1 MAYER, M. G.; FLOETER-WINTER, L. M. Pre-mRNA trans-splicing: from kinetoplastids to mammals, an easy language for life diversity. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 100, n. 5, p. 501-513, Aug. 2005.

2 ULLU, E.; TSCHUDI, C.; GÜNZL, A. Accurate modification of the Trypanosome spliced leader cap structure in a homologous cell-free system. **Journal of Biological Chemistry**, v. 270, n. 35, p. 20365-20369, Sept. 1995.

3 SILVA, M. T. A.; AMBRÓSIO, D. L.; TREVELIN, C. C.; WATANABE, T. F.; LAURE, H. J.; GREENE, L. J.; ROSA, J. C.; VALENTINI, S. R.; CICARELLI, R. M. B. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 106, n. 2, p. 130-138, Mar. 2011.

PG96

Estudos estruturais e moleculares de enzimas alvo de *Xanthomonas albilineans* para o desenvolvimento de novos candidatos a agroquímicos para a cultura de cana-de-açúcar

LIMA, G. M. A.¹; GUIDO, R. V. C.¹

gustavo.alvares.lima@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O importante papel das fontes renováveis na matriz energética brasileira faz da indústria sucroalcooleira um setor chave na economia do Brasil. (1) O enorme sucesso do etanol de cana-de-açúcar como biocombustível está na produtividade energética do canavial, superior à produtividade energética de milho, por exemplo. (2) Nesse sentido, o combate a fatores que diminuem a qualidade energética dos canaviais é uma medida essencial, com destaque para as fitopatologias que acometem a cana-de-açúcar. A escaldadura-das-folhas é uma fitopatologia causada pela bactéria gram-negativa *Xanthomonas albilineans*, sendo encontrada em praticamente todas as regiões do mundo onde a planta é cultivada. A necessidade de reforma precoce no canavial e perda de produtividade pela diminuição da qualidade do caldo extraído da planta estão entre os principais danos causados pela fitopatologia. (3) Atualmente, não existem alternativas químicas ou biológicas para o controle dessa doença. Portanto, quando a fitopatologia é identificada no campo há necessidade urgente de reforma de toda a plantação para contenção da bactéria. Nesse contexto, é extremamente necessário a descoberta e desenvolvimento de moléculas bioativas como candidatos a novos agroquímicos para a cultura de cana-de-açúcar. Para tanto, duas abordagens foram seguidas para a identificação e validação de novos candidatos a agroquímicos: **i.** foi desenvolvido e validado um novo bioensaio para a triagem e identificação de moléculas bioativas frente a cultura de *X. albilineans*. O método permite a determinação de propriedades biológicas de moléculas como a Concentração Inibitória Mínima (MIC, do inglês, *minimum inhibitory concentration*) e a Concentração Não-Inibitória (NIC, do inglês, *non-inhibitory concentration*). A padronização e validação do bioensaio é uma etapa fundamental para a triagem de compostos naturais e sintéticos frente a cultura de *X. albilineans*; **ii.** a identificação de duas vias bioquímicas essenciais para o patógeno, a via de biossíntese de albicidinas e a via de biossíntese de folatos. Duas enzimas, XaPPT da via de albicidinas e XaFolk da via de folatos, foram selecionadas e clonadas em *E. coli* para a expressão solúvel em larga escala, tornando possível a resolução da estrutura 3D das proteínas e o subsequente desenvolvimento racional de inibidores.

Palavras-chave: Agroquímicos. Química medicinal. Cana-de-açúcar.

Referências:

- 1 CENTRO DE GESTÃO E ESTUDOS ESTRATÉGICOS. **Bioetanol combustível:** uma oportunidade para o Brasil. Brasília, DF: CGEE, 2009.
- 2 JEANROY, A. **Beet ethanol production:** economically viable and sustainable?. CGB Report 2011.



Disponível em: <<http://www.isosugar.org/Egypt/GL2.2.pdf>>. Acesso em: 8 ago. 2014.

3 BIRCH, R. G. *Xanthomonas albilineans* and the antipathogenesis approach to disease control. **Molecular Plant Pathology**, v. 2, n. 1, p. 1-11, 2001.

PG97

Structural and functional studies of a fructosyltransferase of *Bifidobacterium adolescentis* from the family 32 of glycoside hydrolases

LIMA, M. Z. T.¹; POLIKARPOV, I.¹; MUNIZ, J. R. C.¹

marianaztdelima@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The growing insecurity worldwide availability of non-renewable resources from oil as an energy source combined with a large increase in its demand in the world promoted the incentive of the search for diversification of energy (especially renewable) as an aid for the lessening of not only carbon emissions, but also to reduce the overall climate impact generated by fossil fuels. (1) Thus, biomass from plants is an alternative, renewable and sustainable energy, as well as much less expensive when compared to non-renewable resources currently available. (2) On second generation biofuel production the pretreated biomass is enzymatically hydrolyzed using cellulases identified as glycoside hydrolases. Those enzymes act synergistically to catalyze the hydrolysis of cellulose and are considered an ideal solution in cellulose degradation since it can be applied in mild conditions and presents a high yield of fermentable carbohydrates. (3) In this context, the present work aims to the study of an enzyme described as fructosyltransferase from the family 32 of glycoside hydrolases belonging to *Bifidobacterium adolescentis*. This family of enzymes is characterized by a group of enzymes responsible for catalyzing the transfructosylation reactions from sucrose, presenting quite relevant characteristics of the molecular point of view and the mechanisms that lead to their synthesis, as the catalysis of certain substrates and formation of its products described as fructooligosaccharides. The nucleotide sequence of the gene corresponding to GH32 was cloned and expressed. The result of the expression and purification was a high concentrated protein of about 31 mg/mL per liter of culture. With the help of a crystallization robot (Gryphon, from Art Robbins Instruments, USA), more than 1500 conditions were tested using sparse matrix method and commercial reagents kits from Hampton and Qiagen. Several promising conditions were identified. One particular drop containing 0.2 M Lithium chloride, 0.1 M MES pH 6; 20% (w/v) PEG 6000 gave rise to crystals suitable enough for X-ray diffraction and structure resolution. We report here the apo structure of this fructosyltransferase, described as a beta-fructofuranosidase from *Bifidobacterium adolescentis* and its complex with fructose. This result combined with the initial studies of the enzymatic activity and biophysical assays developed in our lab, might promote the elucidation of the enzymatic processes which involves the fructosyltransferases, whether hydrolysis of sucrose or fructose polymerization. Furthermore, the disclosure of such mechanisms is an important step in food industry and sugarcane, in order to identify new techniques not only for handling but also for the use of available resources in the light of improvement, optimization and control of those processes.

Keywords: Glycoside hydrolases. Fructosyltransferases. Fructooligosaccharides.

Referências:

- 1 CHUNDAWAT, S. P. S. et al. Deconstruction of lignocellulosic biomass to fuels and chemicals. **Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering**, v. 2, p. 121-145,2011. doi: 10.1146/annurev-chembioeng-061010-114205.
- 2 MOHANRAM, S. et al. Novel perspectives for evolving enzyme cocktails for lignocellulose hydrolysis in biorefineries. **Sustainable Chemical Processes**, v. 1, 2013. doi: 10.1186/2043-7129-1-15 .
- 3 CANILHA, L. et al. Bioconversion of sugarcane biomass into ethanol: an overview about composition, pretreatment methods, detoxification of hydrolysates, enzymatic saccharification, and ethanol fermentation. **Journal of Biomedicine & Biotechnology**, v. 2012, 2012. doi:10.1155/2012/989572.

PG98**Testemunha de emaranhamento generalizada**LIMA, R. B. B.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹

rafael.bruno.lima@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A evolução da ciência e o aprofundamento em suas áreas cada vez mais complexas trouxe consigo novos desafios, onde há a necessidade de realizar inúmeras operações simultaneamente, tanto que o computador como o qual conhecemos já não era mais suficiente. Então criou-se a ideia da computação quântica, capaz de realizar cálculos antes inimagináveis. Mas para isso é necessário entender como funciona a troca de informações entre sistemas no mundo quântico. Assim, a popularização da ideia do computador quântico trouxe também uma série de estudos baseados em informação quântica, mais precisamente sobre estados emaranhados e suas relações com as trocas de informações. Esse trabalho consiste em desenvolver um critério de emaranhamento generalizado para sistemas bipartidos e multipartidos, e aplicá-lo no modelo de Heisenberg com campo magnético transversal. Esse critério é baseado na covariância de um observável do sistema, porém pode ser reduzido a variância, uma vez que esta é mais adequada para a aplicação em sistemas físicos. (1) Desta forma, utilizou-se sistemas em contato com reservatórios térmicos na condição de equilíbrio para calcularmos as testemunhas de emaranhamento, fundamentadas na susceptibilidade magnética e no calor específico, ambos baseados na variância do observável. (2-3)

Palavras-chave: Covariância. Testemunha de emaranhamento. Informação quântica.**Referências:**

- 1 HOFMANN, H. F.; TAKEUCHI, S. Violation of local uncertainty relations as a signature of entanglement. **Physical Review A**, v. 68, n. 3, p. 032103-1-032103-6, 2003.
- 2 WIESNIAK, M.; VEDRAL, V.; BRUKNER C. Magnetic susceptibility as a macroscopic entanglement witness. **New Journal of Physics**, v. 7, p. 258-1-258-7, 2005. doi: 10.1088/1367-2630/7/1/258.
- 3 HUANG, Y. Variance-based uncertainty relations. **Physical Review A**, v. 86, n. 2, p. 024101-1-024101-2, 2012.

PG99

Caracterização de uma série de acridinonas sintéticas com propriedades anticâncer.

MAGALHAES, L. G.¹; MARQUES, F. B.²; GRAEBIN, C. S.²; ANDRICOPULO, A. D.¹

luma.magalhaes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ

Câncer é a denominação dada a um conjunto de doenças caracterizadas pelo crescimento e multiplicação de células anômalas capazes de invadirem e migrarem (metástase) por diversos tecidos. As projeções da OMS para 2015 são de que 15% das mortes no mundo serão causadas por câncer e, apesar do grande número de quimioterápicos existentes, estes estão sujeitos à elevada toxicidade e resistência. (1) Nesse contexto, o planejamento racional de novas substâncias mais eficazes se faz necessário. A metástase é o principal evento que leva à morte pela doença, o que torna a migração celular um bom alvo para o desenvolvimento de novas terapias antitumorais. No presente trabalho de mestrado foi feita a caracterização de novas substâncias com propriedades anticâncer através da integração de métodos computacionais e experimentais. Uma série de 17 acridinonas sintéticas foi avaliada segundo métodos de docagem molecular frente à proteína tubulina, que é um alvo anticâncer amplamente validado e está envolvida no processo de migração celular. (2) O resultado dessa avaliação indicou que as moléculas poderiam interagir com um sítio modulador da tubulina (sítio da colchicina), e portanto interferir nos processos de migração e divisão celular. (3) Para verificar essas características, foram conduzidos ensaios celulares empregando-se as linhagens tumorais MDA-MB-231 e DU-145. As moléculas foram inicialmente avaliadas quanto à capacidade de inibir a migração através do ensaio *wound healing*, após o qual quatro moléculas capazes de inibir a migração celular em cerca de 70% foram selecionadas e tiveram seus valores de IC₅₀ de migração determinados por ensaios celulares em câmara de Boyden. As moléculas apresentaram alta potência, com valores de IC₅₀ variando de 300 nM a 1 μ M. Também fez-se a caracterização quanto à capacidade das moléculas inibirem a proliferação de células tumorais através do ensaio celular MTS, pelo que as moléculas apresentaram valores de IC₅₀ variando de 100 nM a 2 μ M. Para finalizar o trabalho, estudos frente ao alvo molecular tubulina estão sendo realizados através de ensaios in vitro de polimerização dessa proteína. Também será avaliada a influência das moléculas na progressão do ciclo celular através de citometria de fluxo. Além disso, estes resultados abrem perspectivas para a realização de modificações na série de moléculas a fim de estabelecerem-se relações de estrutura atividade.

Palavras-chave: Câncer. Migração celular. Tubulina.

Referências:

1 RANG, H. P. et al. **Rang and dale pharmacology.** Philadelphia: Churchill Livingstone, 2008.

2 JORDAN, M. A.; WILSON, I. Microtubules as a target for anticancer drugs. **Nature Reviews Cancer.**, v. 4, n.4, p. 253-265, 2004.

3 FOJO, T. **The role of microtubules.** . Totowa: Humana Press, 2008.

PG100

Enolase de *P. falciparum* : biologia estrutural e triagem virtual de moléculas

MALUF, F. V.¹; BACHEGA, J. F. R.²; BUENO, R. V.¹; GARCIA, C. R. S.³; OLIVA, G.¹; GUIDO, R. V. C.¹

fernandovmaluf@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Laboratório de Bioinformática, Modelagem e Simulação de Biosistemas - PUCRS

³Instituto de Biociências - USP

A intensificação das políticas de saúde pública impactou significativamente nos números de novos casos e mortes por malária, porém, dados de 2013 apontam um cenário alarmante com 207 milhões de casos de malária e 627 mil mortes ao redor do mundo. (1) Esta situação tem se agravado com o surgimento de cepas de *Plasmodium falciparum* (agente etiológico da forma mais severa de malária) resistentes aos fármacos disponíveis. (2) Desta maneira, a seleção e validação de alvos moleculares com potencial para o desenvolvimento de novos fármacos torna-se imprescindível. A via glicolítica, composta por dez enzimas, é considerada atrativa para o planejamento de fármacos, uma vez que é o sistema primordial para obtenção de energia pelo parasita. (3) A enolase, nona enzima desta via, é responsável pela catálise do substrato 2-fosfoglicerato (2-PGA) em fosfoenol piruvato (PEP), e por sua função chave na produção energética do parasita é considerada um alvo promissor para desenvolvimento de antimaláricos. Assim, este trabalho teve como objetivo a determinação da estrutura tridimensional da enolase e seu emprego na triagem virtual de moléculas. A enolase foi clonada, a partir de uma biblioteca de cDNA de *P. falciparum*, no vetor pETTrx-1a e expressa em sistema bacteriano (Rosetta DE3). A purificação consistida de etapas sequenciais por cromatografia de afinidade e exclusão por tamanho, permitiu sua obtenção com elevado teor de pureza. Condições de cristalização na forma de matriz esparsa foram avaliadas pela técnica de difusão de vapor e após sucessivas etapas de otimização, uma condição permitiu o crescimento de cristais adequados para os estudos de difração de raios X. Conjuntos de dados a alta resolução (1.6 Å) foram coletados em difratômetro Micromax-007 - R-AXIS IV++ (Rigaku) e na linha MX2 do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. A estrutura foi resolvida por substituição molecular empregando a enolase de *T. brucei* como modelo de busca e o refinamento convergiu com valores de Rfator = 0,17 e Rfree = 0,22. A estrutura determinada revelou o sítio catalítico em sua conformação aberta (devido a ausência do substrato na condição de cristalização), possibilitando o emprego da triagem virtual para identificação de novas moléculas candidatas a inibidores. O subconjunto *leadlike* do banco de moléculas ZINC, com até 60 % similaridade foi filtrado para remoção de compostos reativos e/ou possivelmente tóxicos. Após a geração de confôrmeros pelo programa LigPrep (Schrödinger), as 43.910 moléculas resultantes tiveram suas cargas parciais calculadas por duas estratégias: i. OPLS 2005 (Glide) e ii. cálculo semi empírico com conjunto de bases 631G** (Orca). As moléculas foram então, triadas através de docagem molecular empregando os módulos SP e XP do programa Glide (Schrödinger). As vinte primeiras moléculas ranqueadas (por GlideScore) de cada estratégia estão em processo de compra e

serão avaliadas experimentalmente, o que permitirá a identificação da estratégia com melhor desempenho no retorno de verdadeiros positivos. Ademais, as moléculas bioativas identificadas serão conduzidas para etapas posteriores do processo de planejamento de fármacos antimaláricos.

Palavras-chave: Enolase. *Plasmodium falciparum*. Triagem virtual.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Malaria**. Fact Sheet n. 94. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs094/en/>>. Acesso em: 15 ago. 2014.

2 FIDOCK, D. A. et al. Recent highlights in antimalarial drug resistance and chemotherapy research. **Trends in Parasitology**, v. 24, n.12, p. 537-544, 2008.

3 OLSZEWSKI, K.L.; LLINÁS, M. Central carbon metabolism of *Plasmodium* parasites. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 175, n. 2, p. 95-103, 2011.

PG101

Aplicação da imagem por ressonância magnética para identificação de injúrias mecânicas e tecidos deteriorados em sementes

MARASSI, A. G.¹; GOMES JUNIOR, F. G.²; VIDOTO, E. L. G.¹; CONSALTER, D. M.¹; MARTINS, M. J.¹; TANNÚS, A.¹

agide@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz- USP

Injúrias mecânicas são um dos principais fatores que afetam negativamente a qualidade de sementes (1) e seus efeitos podem ser evidenciados após a ocorrência do dano ou durante seu armazenamento, com a manifestação de patógenos. Entre os fatores que influenciam sua ocorrência destacam-se as características da semente, como tamanho, forma, espessura do tegumento, tecido de reserva e posição do eixo embrionário. Quando as injúrias são aberturas localizadas no pericarpo ou tegumento podem se tornar pontos de infecção e fonte de nutrientes por patógenos. (2) Primeiramente a avaliação dessas alterações era feita utilizando produtos químicos de contraste, porém esse método foi considerado inconveniente, pois além de não permitir a germinação da semente não identificam com precisão a relação dos danos com as anormalidades nas plântulas ou morte dos embriões. Um avanço significativo foi obtido através da introdução de teste de raios X, porém ficou constatado que a identificação só é possível quando as lesões estão em estágios avançados. Assim, a aplicação de procedimentos mais rigorosos na avaliação da ocorrência de injúrias mecânicas e tecidos deteriorados, como a imagem por Ressonância Magnética, que, além de ser não invasiva permite que o contraste na imagem possa representar os detalhes anatômicos, visualizar a distribuição de uma série de parâmetros físico-químicos e observar alterações dependentes do tempo através de consecutivas repetições da medida (3), possivelmente poderão contribuir para uma evolução da pesquisa em Tecnologias de Sementes.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Tecnologia de sementes. RMN.

Referências:

1 BEWLEY, J.D.; BLACK, M. **Seeds**: physiology of development and germination. 2nd ed. New York: Plenum Press, 1994. 445p.

2 PETERSON, J.M.; PERDOMO, J.A.; BURRIS, J.S. Influence of kernel position, mechanical damage and controlled deterioration on estimates of hybrid maize seed quality. **Seed Science and Technology**, v. 23, n. 3, p. 647-657, 1995.

3 KÖCKENBERGER, W. et al. High resolution NMR microscopy of plants and fungi. **Journal of Microscopy**, v. 214, part 2, p.182-189, 2004.

PG102

Estudo da possibilidade de detecção de matéria escura com telescópios Cherenkov

MARCOMINI, J.¹; SOUZA FILHO, L. V. de¹

je.marcom@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A existência de matéria escura é sustentada pela observação de efeitos gravitacionais sobre a matéria bariônica. Medidas de curvas de rotação e lentes gravitacionais foram utilizadas para calcular a densidade de matéria escura necessária para causar os efeitos gravitacionais observados. Alguns modelos teóricos foram criados para descrever o comportamento observado, porém a natureza das partículas que constituem matéria escura continua desconhecida. A descrição das propriedades dessas possíveis partículas é crucial para o entendimento desses efeitos e por essa razão encontramos vários experimentos que vem tentando limitar a validade dessas propostas. Telescópios Cherenkov atuais como H.E.S.S., MAGIC (1), VERITAS (2) e Whipple já tem propostas de detecção de matéria escura bastante razoáveis e a contribuição futura do observatório CTA aumenta as expectativas de ter um modelo descritivo de bastante credibilidade. Estes telescópios medem a radiação gama vinda do cosmo com energia entre GeV-TeV de forma que uma possível interação (como exemplo a aniquilação de partículas de matéria escura) poderia ter seu resultado final de raios gama detectado em um desses experimentos. A intensidade desse sinal depende fundamentalmente da massa da partícula de matéria escura, de sua seção de choque e da distribuição de matéria no Universo. A combinação destes fatores traz um carácter único a medida feita por esses telescópios porque ela une informação da interação das partículas com as informações astrofísicas sobre a distribuição da matéria escura em grandes estruturas no Universo. A contribuição do Observatório CTA (Cherenkov Telescope Array) é importante porque traz melhoras em relação a sensibilidade de detecção principalmente por atuar em energias bem abaixo de 100 GeV até acima de 100 TeV. O projeto de mestrado é dividido em duas partes principais. Primeiro foi realizado um estudo que abrange desde as propriedades e modelos de matéria escura até os cálculos necessários para a observação do sinal de raio gama. E a segunda parte terá como objetivo final concluir limites nessas propriedades (seção de choque e massa) focando na potencialidade do Observatório CTA com relação a limites já impostos por outros experimentos.

Palavras-chave: Matéria escura. Astrofísica. Física de partículas.

Referências:

1 ALEKISIC, J. et al. Optimized dark matter searches in deep observations of Segue 1 with MAGIC. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v.2014, Feb.2014. doi:10.1088/1475-7516/2014/02/008.

2 WOOD, M. D. **An indirect search for dark matter with VERITAS**. 2010, Ph. D. Thesis (Philosophy and Astronomy) - University of California, California, 2010.

PG103

Quantificação de gordura hepática utilizando MRS

MARQUES, M. R. H.¹; PAIVA, F. F.¹

marcia.renata.marques@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O fígado gorduroso, doença tecnicamente chamada de esteatose hepática, é um problema que vem preocupando a comunidade médico científico em todo o mundo devido ao aumento do número de casos, isso porque há uma direta ligação com a obesidade - bem como o alcoolismo e diabetes tipo II. Mais de 70% dos pacientes com esteatose são obesos. No Brasil, o problema já atinge mais de 20% da população. No entanto, os métodos atuais para diagnóstico e quantificação da gordura presente no fígado ainda são falhos: com a ultrassonografia não se é capaz de realizar quantificação; quantificação por punção é precisa, mas invasiva e pontual. A Ressonância Magnética, tanto a espectroscopia (MRS) como a imagem (MRI), surge como uma alternativa completamente não invasiva capaz de fornecer diagnóstico e quantificação da gordura existente no fígado, com boa precisão e em tempo hábil. (1) Neste projeto estamos, inicialmente, avaliando a quantificação de dados espectroscópicos utilizando o algoritmo AMARES e o software jMRUI 5.0; com o intuito de aferir a confiabilidade desse algoritmo na quantificação de gordura e sua variabilidade frente às diferentes taxas de ruído. As simulações foram realizadas utilizando o software jMRUI 5.0 *Simulation* e parâmetros como número de pontos, fase de ordem zero, tempo de início e intervalo de amostragem foram fixados em 2048 pontos, zero grau, zero milissegundo e 0,5 milissegundo, respectivamente. Foi gerado um espectro de 6 picos, todos lorentzianos, com frequências e amplitudes bem definidas baseadas em um espectro de gordura hepática (2). A partir do espectro original, foram adicionados níveis de ruídos ao espectro simulado: 0%, 5%, 10%, 15%, 20% e 25% e utilizado simulação de Monte Carlo para gerar 5 sinais equivalentes para cada nível de ruído. A partir dos resultados originados pela quantificação, foi calculada a média e o desvio padrão das amplitudes e taxa de relaxação dos dados para cada nível de ruído. A amplitude e a taxa de relaxação estão diretamente relacionadas à quantificação da gordura, portanto, estimá-las corretamente é essencial para obtermos um resultado confiável. Excetuando-se pelos picos que estão próximos ao pico ou sob o pico da água ou picos raramente encontrados in vivo, tanto a estimativa dos valores das amplitudes do sinal, como a estimativa das taxas de relaxação de cada pico presente no espectro foi contabilizada apropriadamente e satisfatoriamente. Essa variabilidade existente ao estimar parâmetros desses outros picos está associada ao elevado sinal da água que mascara sinais próximos e de baixa intensidade, efeitos de acoplamento J, elevados níveis de ruído (25%) que chegam a ter a mesma ordem de grandeza do pico em questão. Entretanto, nossos resultados iniciais sugerem que o algoritmo AMARES é robusto para a estimativa de parâmetros em espectros de gordura hepática. Na sequência, nossa expectativa é aplicar o mesmo protocolo de análise a dados de espectroscopia por RM obtidos in vivo em pacientes com diferentes níveis de gordura hepática determinados através de biópsia hepática a fim de validar o método.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Esteatose hepática. MRS.

Referências:

- 1 HU, H. H.; KIM, H-W.; NAYAK , K. S.; GORAN, M. I. Comparison of fat-water MRI and single-voxel MRS in the assessment of hepatic and pancreatic fat fractions in humans. **Obesity Journal**, v. 18, n. 4, p. 841-847, 2010.
- 2 HAMILTON, G.; YOKOO, T.; BYDDER, M.; CRUITE, I.; SCHROEDER, M. E.; SIRLIN, C.B.; MIDDLETON, M. S. In vivo characterization of the liver fat 1H MR spectrum. **NRM in Biomedicine**, v.24, n. 7, p. 784-790, 2011.

PG104

Análises da influência dos domínios carboxi-terminais das septinas na interação septina-septina

MARTINS, C. S.¹; MACEDO, J. N. A.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹

carlamartins@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas constituem uma família de proteínas de ligação a GTP, inicialmente identificadas em leveduras, mas que estão presente em vários eucariotos com exceção de plantas. Embora as primeiras septinas tenham sido relacionadas a mutantes para o ciclo celular em leveduras, hoje é evidente a participação das septinas em diversos processos, incluindo a citocinese, determinação e manutenção da polaridade celular, associação a membranas, movimento celular, tráfego de vesículas, entre outros. As septinas compartilham três domínios: um domínio central de ligação a GTP (domínio G) e dois domínios flangeadores amino-terminal e carboxi-terminal (domínios N e C). Entre o domínio N e o G, geralmente há um curto motivo polibásico, o qual já foi demonstrado ligar-se a fosfolípidios de membrana. O domínio C, na maioria das septinas, possui uma região de α -hélice predita como *coiled-coil*, que parece estar envolvida na interação septina-septina. As 13 septinas humanas são classificadas em quatro grupos quanto à similaridade de estrutura primária nos domínios C e as septinas tem como característica a capacidade de interagirem entre si para formar heterocomplexos, os quais polimerizam formando estruturas filamentosas. (1) O complexo de septinas humanas que teve sua estrutura cristalográfica resolvida e está melhor caracterizado é composto por SEPT2, SEPT6 e SEPT7, o qual se apresentou um hexamérico e linear com a seguinte disposição: SEPT7-SEPT6-SEPT2-SEPT2-SEPT6-SEPT7. Os domínios C, embora presentes nas proteínas, não apresentaram densidade eletrônica, sugerindo que estão desordenados no cristal. Porém, há outras evidências que os domínios C das duas unidades de SEPT2 interajam formando um *coiled-coil*, enquanto que os domínios C de SEPT7 e SEPT6 formariam também um *coiled coil*, porém heterodimérico. (2) Até o momento pouco se sabe sobre os fatores que determinam a seleção do parceiro correto de interação para a montagem dos complexos. Entretanto, várias evidências sugerem que os domínios C sejam os principais responsáveis pela seleção de parceiros no momento da montagem dos complexos. (3) A interação entre os C-terminais vizinhos, determinaria a posição dos parceiros corretos, sendo assim, as interações dentro do complexo formado por SEPT2, SEPT6 e SEPT7 não ocorreriam de outra forma, estando as três subunidades disponíveis para a montagem do complexo. Neste contexto o objetivo deste projeto é avaliar a importância dos domínios C na seleção dos parceiros entre septinas. Septinas quiméricas serão produzidas, de forma que os domínios C sejam trocados. Assim, o C-terminal de SEPT6 será substituído pelo mesmo domínio da SEPT2, gerando SEPT6_{2C}, na mesma linha de raciocínio, teremos SEPT2_{6C}, SEPT7_{2C} e SEPT7_{6C}. As proteínas quiméricas serão coexpressas em bactérias aos pares e também com as proteínas selvagens. A copurificação dos pares nos permitirá avaliar se apenas os domínios carboxi-terminais serão suficientes para determinar a seleção dos parceiros, baseado no complexo SEPT7-SEPT6-SEPT2-SEPT2-SEPT6-SEPT7.

Palavras-chave: Septinas. Carboxi-terminais. Interação proteica.

Referências:

- 1 CAO, L.; YU, W.; WU, Y.; YU, L. The evolution, complex structures and function of septin proteins. **Cellular and Molecular Life Science**, v. 66, n. 20, p. 3309-3323, 2009.
- 2 SIRAJUDDIN, M.; FARKASOVSKY, M.; HAUER, F.; KUHLMANN, D.; MACARA, I. G.; WEYAND, M.; STARK, H.; WITTINGHOFER, A. Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.
- 3 ALMEIDA, I. A.; VALADARES, N. F.; GARCIA, W.; DAMALIO, J. C. P.; MACEDO, J. N. A.; ARAÚJO, A. P. U.; BOTELLO, C. A.; ANDREU, J. M.; GARRATT, R. C. Septin C-terminal domain interactions: implications for filament stability and assembly. **Cell Biochemistry and Biophysics**, v. 62, n. 2, p. 317-328, 2012.

PG105

O problema de Fermi-Pasta-Ulam

MASCHIO, E. H. M.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

eduardo.maschio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O modelo de Fermi-Pasta-Ulam (FPU) trouxe uma nova abordagem para o estudo da integrabilidade de equações não-lineares e caos dinâmico, além de sua relevância para equações de Schrödinger não-lineares e também sua conexão com o condensado de Bose-Einstein (BEC). (1) O problema de FPU descreve um sistema composto por um conjunto de osciladores harmônicos que possuem um leve grau de anarmonicidade em que leva a dinâmica do sistema de forma inesperada: existe a equipartição de energia entre os modos de vibração e após longo período, o sistema retorna às condições iniciais, revelando um comportamento ergódico. Diante deste cenário, a possibilidade de se estudar a influência de não-linearidades em sistemas físicos de interesse, como o BEC (2), o comportamento de sólitons (*stable solitary waves*) em meios não lineares, entre outros fenômenos não-lineares, desperta o interesse na investigação de tais fenômenos no panorama da informação quântica. O presente trabalho tem como objetivo revisitar o problema e estudar suas propriedades, de modo a comparar seu comportamento com o de sistemas óptico-mecânicos, outro sistema não-linear, cujas dinâmicas de emaranhamento e suas dependências com o caráter não-linear foram estudadas recentemente. (3)

Palavras-chave: Fermi-Pasta-Ulam. Não-linearidade. Condensado de Bose-Einstein.

Referências:

1 BERMAN, G. P.; IZRAILEV, F. M. The Fermi-Pasta-Ulam problem: fifty years of progress. **Chaos**, v. 15, n. 1, p. 015104-1-015104-18, 2005.

2 VILLAIN, P.; LEWENSTEIN, M. Fermi-Pasta-Ulam problem revisited with a Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 62, n. 4, p. 043601-1-043601-11, 2000.

3 WANG, G.; HUANG, L.; LAI, Y.C.; GREBOGI, C. Nonlinear dynamics and quantum entanglement in optomechanical systems. **Physical Review Letters**, v. 112, n. 11, p. 110406-1-110406-6, 2014.

PG106

Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco *Gymnotus carapo*

MATIAS, P.¹; SLAETS, J. F. W.¹

paulo.matias@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Peixes elétricos de campo elétrico fraco da espécie *Gymnotus carapo* comunicam-se emitindo pulsos de formato aproximadamente fixo, variando apenas o intervalo entre disparos de acordo com a informação a ser transmitida. (1) Esse tipo de codificação simples é bastante similar ao encontrado em diversos sistemas de neurônios conhecidos, o que torna esses animais muito interessantes para o estudo de sistemas de comunicação, propiciando experimentos que envolvem tanto aspectos comportamentais quanto de codificação neural. O desenvolvimento de instrumentação eletrônica e de métodos de processamento de sinais permite a realização de novas variedades de experimento, expandindo os horizontes da pesquisa na área. Foi criado um método para a realização de experimentos *in vivo*, não-invasivos, com dois peixes nadando livremente em um mesmo aquário, utilizando-se duas diferentes técnicas de processamento digital de sinais. A primeira consiste em identificar características individuais presentes no formato dos pulsos de eletrocomunicação de cada peixe por meio de ferramentas como a transformada wavelet complexa de dupla árvore (2) e a máquina de vetores de suporte. (3) A segunda técnica utiliza o comportamento de continuidade da amplitude e da fase dos sinais coletados em um conjunto de eletrodos para identificar um pulso com base no pulso anterior emitido pelo mesmo peixe. Como continuidade deste trabalho, será desenvolvida instrumentação eletrônica para a realização de experimentos com retroalimentação (*feedback*) em tempo real, o que permitirá estudar a existência de mecanismos de JAR (*jamming avoidance response*) (4-5), além dos mecanismos de comunicação social entre indivíduos da espécie. Desta forma, serão realizados experimentos *in vivo* inéditos, com um grau de naturalismo e liberdade de experimentação bastante acima do encontrado atualmente na literatura.

Palavras-chave: Neurobiofísica. Processamento de sinais. Aprendizagem de máquina.

Referências:

- 1 BENNETT, M. V.; GRUNDFEST, H. Electrophysiology of electric organ in *Gymnotus carapo*. **The Journal of General Physiology**, v. 42, n. 5, p. 1067-1104, 1959. doi 10.1085/jgp.42.5.1067.
- 2 BAYRAM, I.; SELESNICK, I. On the dual-tree complex wavelet packet and m-band transforms. **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 56, n. 6, p. 2298-2310, 2008. doi 10.1109/TSP.2007.916129.
- 3 CORTES, C.; VAPNIK, V. Support-vector networks. **Machine Learning**, v. 20, n. 3, p. 273-297, 1995. doi 10.1007/BF00994018.

PG107

Modelagem molecular no desenvolvimento de modelos para estudos da permeabilidade

MATOS, K. S.¹; MODA, T. L.¹; ANDRICOPULO, A. D.¹

karinamatos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Após administração por via oral, o fármaco deve ser dissolvido e solubilizado no trato gastrointestinal. Posteriormente, deve ser absorvido no estômago ou intestino (absorção intestinal humana, do inglês, *Human Intestinal Absorption* - HIA), caracterizando-se em uma das mais importantes vias. (1) Modelos *in vitro*, que mimetizam membranas e barreiras biológicas são usados para estudos de permeabilidade, tais como o modelo de células caco-2 (derivadas de adenocarcinoma humano que mimetizam os enterócitos do intestino) e o ensaio de permeabilidade em membrana artificial paralela, PAMPA (do inglês, *Parallel Artificial Membrane Permeability Assay*) (2), além do emprego fundamental de modelos *in silico* na avaliação de propriedades físico-químicas e farmacocinéticas de substâncias bioativas. (3) Neste trabalho são descritos modelos *in silico* preditivos, através do método de fragmentos moleculares, holograma QSAR (HQSAR), para a avaliação dos parâmetros que definem a permeabilidade de compostos bioativos em células Caco-2 e PAMPA. Estes modelos são de grande relevância, pois poderão ser aplicados a ensaios biológicos experimentais de determinação de propriedades farmacocinéticas, para diversos compostos em estudo no LQMC. Os melhores resultados estatísticos (coeficiente de correlação linear quadrático com validação cruzada) para um conjunto treinamento de 470 compostos foram obtidos utilizando a combinação A/C/DA de fragmentos moleculares. O valor de r^2 adequado sugere que valores de permeabilidade em células Caco-2 podem ser preditos por um modelo construído com as variáveis deste conjunto de dados. Foi observada ainda, uma boa concordância entre os valores de permeabilidade preditos e experimentais para a validação interna e externa do modelo. Os resultados para modelagem dos dados de PAMPA serão apresentados oportunamente. A estratégia de modelagem molecular abordando modelos preditivos para mimetização de propriedades que influenciam a administração de fármacos por via oral é uma ferramenta útil no planejamento de novos compostos bioativos. Estes modelos poderão auxiliar no planejamento de novos candidatos a fármacos em nosso laboratório.

Palavras-chave: Células Caco-2. HIA. Modelagem HQSAR.

Referências:

1 MODA, T. L.; ANDRICOPULO, A. D. Consensus hologram QSAR modeling for the prediction of human intestinal absorption. **Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters**, v. 22, n. 8, p. 2889-2893, 2012.

2 LI, P. A. Screening for human ADME/Tox drug properties in drug discovery. **Drug Discovery Today**, v. 6, n. 7, p. 357-366, 2001.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 MAY, M. . **Simulations vs. Cells in ADME/Tox.** Disponível em: <<http://www.dddmag.com/products/2011/10/simulations-vs-cells-adme/tox>> Acesso em: 02 ago 2014.

PG108

Caracterização estrutural e funcional de FleQ de *Pseudomonas* e *Xanthomonas*: um importante fator de transcrição envolvido na expressão dos genes flagelares e de formação de biofilme

MATSUYAMA, B. Y.¹; NAVARRO, M. V. A. S.¹

brunomatsuyama@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A formação do biofilme bacteriano está associada a diversos fatores externos como quantidade de nutrientes e presença de antibióticos. Nos últimos anos esse processo tem sido elucidado a nível molecular, com destaque para o mensageiro secundário c-di-GMP, o qual encontra-se apenas em bactérias e cujos níveis intracelulares regulam entre outros processos a adesão celular e a síntese da matriz exopolissacarídica, controlando a formação do biofilme, responsável por diversas doenças infecciosas. (1) Em *Pseudomonas aeruginosa* (PA) foi identificado um fator de transcrição não usual da família das Enhancing Binding Proteins (FleQ), que é ativado por c-di-GMP. (2) De uma forma dependente de c-di-GMP, FleQ atua tanto na transcrição de genes flagelares quanto na regulação da expressão do operon pel, envolvido na síntese de exopolissacarídeo. Embora se saiba que a interação com c-di-GMP converta FleQ de repressor para ativador do operon pel, aspectos moleculares dos mecanismos envolvidos nessa regulação são totalmente desconhecidos. (3) Para compreender melhor o mecanismo de ação da FleQ, resolvemos as estruturas tanto do seu domínio N-terminal, FleQ, de função desconhecida e que dá nome a proteína, como o domínio AAA, na sua forma apo e complexada com c-di-GMP, ADP e ATP *gamma* S. Análises do domínio FleQ mostram que apesar da semelhança estrutural com os domínios REC, ele possui uma região distinta de conservação, a qual acreditamos ser a interface de interação com sua proteína reguladora, FleN. Identificamos também, a partir das estruturas do domínio AAA na sua forma holo, que o ATP e o c-di-GMP interagem em regiões distintas da proteína. Sendo que a ligação do dímero de c-di-GMP promove um deslocamento da extremidade N-terminal em direção ao sítio de ligação à ATP do AAA, o que causaria a inibição da atividade ATPase da FleQ. Ensaios calorimétricos permitiram confirmar alguns dos resíduos essenciais para a interação com o c-di-GMP. Estudos de oligomerização e de atividade ATPase de FleQ indicam uma possível comunicação entre os sítios de ligação à ATP e c-di-GMP, e que é necessário que ambos os sítios estejam intactos para a proteína ser ativa. Esses resultados revelam como c-di-GMP pode estar inibindo a capacidade da FleQ em remodelar a RNA polímerase *sigma* 54, um processo dependente da hidrólise de ATP, e conseqüentemente, diminuindo a transcrição dos genes flagelares.

Palavras-chave: c-di-GMP. FleQ. Biofilme.

Referências:

1 RÖMLING, U.; GOMELSKY, M.; GALPERIN, M.Y. C-di-GMP: the dawning of a novel bacterial signalling system. **Molecular Microbiology**, v. 57, n. 3, p. 629-639, 2005.

2 ARORA, S. K.; RITCHINGS, B. W.; ALMIRA, E.C.; LORY, S.; RAMPHAL, R. A transcriptional activator, FleQ, regulates mucin adhesion and flagellar gene expression in *Pseudomonas aeruginosa* in a cascade manner. **Journal of Bacteriology**, v. 179, n. 17, p. 5574-5581, 1997.

3 BARAQUET, C.; HARWOOD, C.S. Cyclic diguanosine monophosphate represses bacterial flagella synthesis by interacting with the Walker A motif of the enhancer-binding protein FleQ. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, 2013. doi: 10.1073/pnas.1318972110.

PG109

The atomic lighthouse E

MAXIMO, C. E.¹; COURTEILLE, Ph. W.¹; BACHELARD, R.¹

dumax1@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Cold atomic clouds are particularly attractive experimentation platforms as powerful techniques not only allow to shape the density distribution but also to fine-tune the light-matter interaction over wide ranges. Here we show that sufficiently cold atomic clouds exposed to a gradient of the strength of the light-matter interaction deflect light due to collective scattering in the single scattering regime. We propose to implement the required gradient by an inhomogeneous magnetic field exploiting the Zeeman effect. Because this phenomenon is reminiscent of an effect studied in nuclear physics called "lighthouse effect" (1-3), we call this effect the "atomic lighthouse effect". We will show in this presentation that the atomic lighthouse effect can be obtained on a two level scheme and is a result of the interference of the light radiated by independent atoms. Similarly to Bragg scattering, it is thus fully determined by the single-photon structure factor of the atomic cloud. However, light-induced interatomic cooperation dramatically alters the lighthouse effect in the case of optically dense samples. We prove this via calculations and simulations accounting for the light-induced interactions between the atoms in the multiple scattering regime. The alteration can be understood as an increase in the atomic linewidth, due to the atoms cooperation, that reduces the Zeeman effect. Hence, the lighthouse reduction provides a direct signature of cooperativity.

Keywords: Light scattering. Radiation-matter interaction. Cold atoms.

Referências:

- 1 RÖHLSBERGER, R. et al. Coherent resonant x-ray scattering from a rotating medium. **Physical Review Letters**, v. 84, n. 5, p. 1007-1010, 2000.
- 2 RÖHLSBERGER, R. et al. The nuclear lighthouse effect: a new tool for high-resolution X-ray spectroscopy. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 467-468, part 2, p. 1473-1476, 2001.
- 3 ROTH, T. et al. Coherent nuclear resonant scattering by $(61)\text{Ni}$ using the nuclear lighthouse effect. **Physical Review B**, v. 71, n. 14, p. 140401-1-140401-4, 2005.

PG110

Estudos de metatranscriptômica e proteômica: identificação e caracterização de novas enzimas com potencial na hidrólise de ligações glicosídicas

MELLO, B. L.¹; POLIKARPOV, I.¹

bruno.luan.mello@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com o aumento da população mundial, a vida moderna cada vez mais dependente de eletricidade e o desenvolvimento econômico dos países subdesenvolvidos, o consumo de energia no mundo tem aumentado a uma taxa acelerada. No Brasil, por exemplo, houve um aumento de 50% entre 1996 e 2010. (1) Esse aumento na demanda e a necessidade da diversificação da matriz energética aliados à preocupação com o meio ambiente torna necessária a busca por novas fontes energéticas renováveis. A biomassa pode ser usada alternativamente para a produção do chamado etanol de segunda geração. Entretanto, os altos custos envolvidos atualmente no seu pré-tratamento, transporte e produção de enzimas tornam o processo economicamente não viável. (2) Enquanto a hidrólise da biomassa é um problema para a indústria, ela é realizada efetivamente na natureza por comunidades microbianas. Contudo, como menos de 1% dos microorganismos é cultivável em cultura pura, a hidrólise da mesma foi estudada utilizando apenas alguns poucos organismos modelo. (3) Neste trabalho, objetiva-se descobrir novas enzimas e proteínas associadas à digestão da lignocelulose, de forma a tornar a hidrólise da biomassa mais eficiente e barata. Para isso foi usada uma abordagem que integra proteômica e metatranscriptômica no estudo de uma comunidade microbiana proveniente de uma compostagem. Essa comunidade foi crescida em meio mínimo suplementado com bagaço de cana-de-açúcar e o seu metaproteoma e metatranscriptoma foi analisado ao longo de 5 semanas. A partir da análise dos dados obtidos, serão escolhidas 96 proteínas para a clonagem, expressão e seu estudo mais aprofundado.

Palavras-chave: Etanol de segunda geração. Metatranscriptômica. Metaproteômica.

Referências:

- 1 EMPRESA DE PESQUISA ENERGETICA - EPE. **Balanco energético nacional 2011**: ano base 2010. Disponível em: <<http://ben.epe.gov.br/BENRelat/unhbox/voidb@x\bgroup\let\unhbox\voidb@x\setbox\@tempboxa\hbox{\global\mathchardef\accent@spacefactor\spacefactor}\accent19o\egroup\spacefactor\accent@spacefactorrioFinal2011.aspx>>. Acesso em: 14 mar. 2012.
- 2 HOOD, E. E. et al. Subcellular targeting is a key condition for high-level accumulation of cellulase protein in transgenic maize seed. **Plant Biotechnology Journal**, v. 5, n. 6, p. 709-19, 2007.
- 3 WARNECKE, F.; HESS, M. A perspective: metatranscriptomics as a tool for the discovery of novel biocatalysts. **Journal of Biotechnology**, v. 142, n. 1, p. 91-5, 2009.

PG111

Exploring the selectivity of metal ions in the active site of superoxide dismutase enzyme using site directed mutagenesis

MENDOZA, E.¹; GARRATT, R. C.¹; FERREIRA JÚNIOR, J. R.²

mery_mendoza17@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Artes, Ciências e Humanidades - USP

Superoxide dismutases (SODs) are metalloenzymes, used as a defense against oxidative damage caused by reactive oxygen species (ROS) in aerobic organisms, through the conversion of superoxide anion into molecular oxygen (O₂) and hydrogen peroxide (H₂O₂). Superoxide dismutases of Fe and Mn have sequences that are highly conserved, especially those residues that are around the active site (including all direct metal ligands), and their crystal structures superimpose well.⁽¹⁾ However, with few exceptions, each enzyme is specific for only one of the two metals and the metal in the active site is changed (iron by manganese or vice versa) the result is a non- functional enzyme. The objective of this research project is to identify structural determinants of Fe/MnSODs necessary to metal specificity. We intend to use statistical coupling analysis (SCA) to select amino acid residues for site-directed mutagenesis in TrMnSOD. Mutant genes were constructed and their proteins are being expressed, purified and crystallized. The tridimensional structure of such mutants will be solved by X-ray crystallography and their enzymatic activities determined, as well as their electron paramagnetic resonance spectra. We hypothesize that SCA is useful to indentify amino acid candidates for site- directed mutagenesis to design new SODs with intermediated Fe/Mn specificity, and even metal specificity interconversion, by studying the evolutionary history of these proteins

Keywords: Superoxide dismutases. Metalloenzymes. Cristallography.

Referências:

1 BACHEGA, J. F. et al. Systematic structural studies of iron superoxide dismutases from human parasites and a statistical coupling analysis of metal binding specificity. **Proteins**, v. 77, n. 1, p. 26-37, Oct. 2009.

PG112

Identification and characterization of *Staphylococcus aureus* DacA enzyme inhibitors

MENEGHELLO, R.¹; NAVARRO, M. V. de A. S.¹

raphaelmeneghello@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Recently, a nucleotide-based molecule, cyclic dimeric adenosine monophosphate (c-di-AMP), has been identified in several pathogenic bacteria, rapidly gaining the status of a central signaling controlling several essential bacterial processes, such as ion transport and DNA damage surveillance. (1) In *Staphylococcus aureus*, c-di-AMP is essential for the cell wall homeostasis and resistance against environmental stresses. Similar to most studied signaling pathways mediated by c-di-GMP, the biosynthesis of c-di-AMP involves the antagonistic enzymatic activities of specific cyclases and phosphodiesterases specific from the domain families DAC (diadenylate cyclase) and DHH/DHHA1 (2-3), respectively. Although the structure of a DNA integrity scanning protein (DisA), which possesses an active DAC domain, has already been determined, little is known about the activation of these enzymes and even the catalytic mechanism of this domain. Our group recently determined the structure of the single enzyme from *S. aureus* and revealed its catalytic mechanism. This project extends the knowledge accumulated in the group, and aims to implement appropriate enzymatic assays for automated processes in order to identify specific inhibitors of Sa_DacA, using different libraries of compounds. Preliminary luminescent assay optimization showed a Z-Factor of 0.744, which enables the scaling up for high-throughput assays. Bioactive compounds identified in these high-throughput screenings will be further characterized with respect to mechanisms of inhibition and inhibitory potency. It is also expected the structural determination of enzyme-inhibitor complexes to gain insights about the determinants of molecular recognition. *In vivo* tests will be implemented to assess the bactericidal or bacteriostatic activity of the inhibitors identified against super-resistant strains of *S. aureus*. The results generated in this project can serve as a basis for future development and studies of new antibiotics, which in combination with currently available treatments could control the infections caused even by the most resistant forms of *S. aureus*.

Keywords: *Staphylococcus aureus*. Diadenylate cyclase. Inhibitors.

Referências:

- 1 CORRIGAN, R.M. et al. c-di-AMP is a new second messenger in *Staphylococcus aureus* with role in controlling cell size and envelope stress. **PLoS Pathogens**, v.7, n.9, p.1002217, 2011.
- 2 ROMLING,U. Great times for small molecules: c-di-AMP, a second Messenger candidate in bacteria and Archaea. **Science Signaling**, v.1, n.33, p.e39, 2008.
- 3 CORRIGAN, R.M.; GRUNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology**, v.11,p.513-524, 2013.doi:10.1038/nrmicro3069.

PG113

Detecção de ruído e análise da confiabilidade de sinais adquiridos *in vivo* por Espectroscopia por Ressonância Magnética (MRS)

MENEZES, L. P.¹; PAIVA, F. F.¹

leon.menezes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Inovações e aprimoramentos na técnica de ressonância magnética são de grande interesse clínico. No caso da espectroscopia *in vivo*, busca-se detectar e estimar a concentração de um ou mais metabólitos de interesse em determinada localização em um organismo. Para isso, é necessário garantir a confiabilidade e a minimização do ruído nos resultados obtidos, o que em sistemas vivos é um problema particularmente complexo, pois abrange também uma parcela de ruído de origem biológica, como por exemplo a movimentação da amostra e interferências por causas fisiológicas. Ruídos dessa natureza afetam o sinal de forma não aleatória, o que dificulta distinguir um espectro como confiável, isto é, embora ele possa ter uma ótima relação sinal-ruído aparente, picos novos podem ser criados dessa forma e outros existentes podem ter suas amplitudes alteradas, levando à uma quantificação errônea. (1) Neste trabalho, buscou-se estabelecer um critério objetivo para avaliar se o ruído presente em um sinal é predominantemente estocástico ou se apresenta componentes determinísticas. Foi considerado que o sinal resultante, gerado pelo decaimento livre de indução (FID) na amostra, é composto por três partes: o sinal puro, o ruído de origem biológica e o ruído de origem instrumental. Enquanto os dois primeiros decaem rapidamente em intensidade, o último tende a se manter em amplitude constante ao longo do tempo de medida. Portanto, o sinal colhido pode ter uma porção relevante de ruído biológico apenas em sua porção inicial, onde está a maior parte da informação do sinal; já na parte final, é capturado predominantemente o ruído instrumental. Este último segue uma distribuição normal e apresenta momentos estatísticos característicos, sendo o terceiro (obliquidade) e o quarto (curtose) nulos. Desta forma, para um conjunto de dados semelhantes, é possível estabelecer para cada ponto colhido do FID os quatro primeiros momentos estatísticos e verificar se, em média, na porção inicial do sinal, eles correspondem com os valores estimados para o caso de um sinal com ruído puramente gaussiano. Foi constatado por sinais simulados computacionalmente que, quando nestes está presente apenas o ruído gaussiano, independentemente de sua amplitude em relação ao sinal puro, os valores de obliquidade e curtose estão sempre próximos a um determinado valor. Ao inserir um ruído que segue outra distribuição, como por exemplo a rician, em proporções acima do ruído gaussiano presente, seu terceiro e seu quarto momentos divergem dos valores esperados, permitindo através deste método reconhecer que o ruído não segue uma distribuição normal e, portanto, que este é determinístico. Dessa forma, em um primeiro momento, conseguimos detectar quando ruídos de origem biológica estão fortemente presentes na amostra. Em etapas posteriores do projeto, serão analisadas formas de filtrar esse ruído, utilizando este método como uma forma de avaliação do sinal filtrado.

Palavras-chave: Espectroscopia por ressonância magnética. Processamento de sinais. Ruídos de origem biológica.

Referências:

1 SLOTBOOM, J. et al. Reliability testing of *in vivo* magnetic resonance spectroscopy (MRS) signals and signal artifact reduction by order statistic filtering. **Measurement Science and Technology**, v. 20, n. 10, p. 104030-1-104030-14, 2009.

PG114

Estados de Fock estacionários em eletrodinâmica quântica de cavidades

MERCADO, W. R.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

wilsonrosado23@hotmail.com

¹Instituto de Física de Saõ Carlos - USP

Nos últimos anos houve grande interesse na descoberta de novos estados não-clássicos do campo eletromagnético quantizado e, a produção desses estados no laboratório, tem exigido esforços consideráveis no desenvolvimento de novos conceitos e ferramentas para o controle de ditos estados. Um grande avanço no campo veio com o micromaser, onde foi possível a realização experimental do modelo de Jaynes-Cummings (JC) e testado muitos outros fenômenos quânticos. (1) Porém, mesmo em meio a grandes avanços tecnológicos, fenômenos como a decoerência ainda são obstáculos a serem superados e a implementação de propostas, como a geração e caracterização de grandes estados de Fock, permanecem como problemas desafiantes experimentalmente. Motivados a continuar a implementação de estratégias que minimizem os efeitos da decoerência e a melhorar a experiência na manipulação de estados do campo, apresentamos uma estratégia para a preparação de estados de Fock estacionários, que se serve fundamentalmente da engenharia de hamiltonianos seletivos. (2) Esta técnica, combina a ação dos mecanismos de amortecimento da cavidade com os de um reservatório atômico construído artificialmente, e pode ser utilizada para fatiar as distribuições de probabilidade no espaço de Fock, permitindo assim a preparação de diferentes estados estacionários não clássicos do campo de radiação. Também, apresentamos a derivação da interação Jaynes-Cummings restrita no espaço de Fock limitado; isto é, entre o estado de vácuo e um estado de Fock escolhido N no domínio de eletrodinâmica quântica de cavidades, em seguida, demonstramos que esta interação específica, resulta em outro método alternativo para a proteção de estados estacionários de Fock.

Palavras-chave: Hamiltonianos seletivos. Estados de Fock. Proteção de estados.

Referências:

- 1 SCULLY, M. O.; SUHAIL ZUBAIRY, M. **Quantum optics**. Cambridge: Cambridge University Press, 1997 .
- 2 PRADO, F. O.; ROSADO, W.; ALCADE, A. M.; MOUSSA, M. H. Y. Engineering selective linear and nonlinear Jaynes-Cummings interactions and applications . **Journal of Physics B**, v. 46, n. 20, p. 205501, 2013.

PG115

Study of Ramsey fringes

MERCADO-GUTIERREZ, E. D.¹; POVEDA-CUEVAS, F. J.¹; DIAS, P. G.¹; MAGALHÃES, D. V.¹; BAGNATO, V. S.¹

emmanuel.dv@usp.br

¹Instituto de Física de Sao Carlos - USP

The Ramsey interferometry method (1) was developed by Norman Ramsey in 1949, which were constructed ideas of his mentor Rabi who originally developed the technique. The Ramsey interferometry method is a polling method relies atoms with two oscillating fields separated in a microwave resonant cavity. In this work we use a Ramsey interferometry method to induce the transition between $5^2S_{1/2}$ and $5^2P_{3/2}$ of the fundamental state of ^{87}Rb , which is equivalent to 6.8 GHz in frequency. Using a microwave generator, we induce the transition of hyperfine sub-level $F = 2, m_F = 0$ to $F = 1, m_F = 0$, in the fundamental state. (2-3) With hybrid trap we generate a spin mixture in the Bose-Einstein condensate (BEC) of ^{87}Rb , and pulsing a Stern-Gerlach-like magnetic field, the BEC is separate in its hyperfine states. After this procedure, we induce the transition in time of flight, which is free of spurious magnetic fields. In this form, we study the Ramsey fringes of a ultra-cold cloud in the classical and quantum regimes.

Keywords: Ramsey interferometry. Spinor. Bose-Einstein condensate.

Referências:

- 1 RAMSEY, N. F. A molecular beam resonance method with separated oscillating fields. **Physical Review**, v. 78, n. 6, p. 695-699, 1950.
- 2 MÜLLER, S. T. **Padrão de frequência compacto**. 2010. 124 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 3 DOERING, D. et al. Ramsey interferometry with an atom laser. **Optics Express**, v. 17, n. 23, p. 20661-20668, 2009.

PG116

Estudo do mecanismo enzimático da di-adenilato ciclase responsável pela síntese de c-di-AMP em *Staphylococcus aureus*

MESQUISTA, N. C. M. R.¹; NAVARRO, M. V. S. A.¹

nathy_physics@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nucleotídeos são moléculas indispensáveis para todas as células vivas, sendo responsáveis por constituir tanto o RNA quanto o DNA, além de serem fontes de energia e sinalização para inúmeros processos celulares. (1) Dentro do âmbito da sinalização, os nucleotídeos estão relacionados a processos celulares que vão desde o metabolismo de carbono, respostas precisas a mudanças ambientais até a formação de biofilme e a expressão de genes relacionados à virulência bacteriana. O último nucleotídeo identificado e relacionado à sinalização bacteriana foi o di-AMP cíclico ou c-di-AMP, o qual mostra-se como segundo nucleotídeo cíclico a ser produzido por bactérias, após o c-di-GMP. O c-di-AMP é produzido a partir de duas moléculas de ATP por di-adenilato ciclases, as quais contêm como característica essencial a presença do domínio DisA_N, onde a síntese desta molécula ocorre, podendo ser degradada a 5-pApA quando na presença de fosfodiesterases, controlando, assim, o seu nível intracelular. (2-3) A molécula de c-di-AMP apresenta-se distribuída entre diversas bactérias e archaea e seu nível intracelular têm sido associado ao controle de diversos processos celulares tais como: a regulação da síntese de ácidos graxos em *Mycobacterium smegmatis*, o crescimento em condições de baixa concentração de baixo potássio em *Staphylococcus aureus*, a detecção da integridade do DNA em *Bacillus subtilis* e a homeostase da parede celular em várias espécies bacterianas. Inúmeros estudos mostraram a relevância da existência desse nucleotídeo no interior de diversos patógenos humanos o que destaca a necessidade de identificar os caminhos celulares que produzem o c-di-AMP e que são regulados pelo o mesmo, visando, assim, explorar caminhos para o desenvolvimento de novas intervenções terapêuticas. Nesse âmbito, o presente trabalho pretendeu contribuir para com a compreensão de mecanismos moleculares de biossíntese do c-di-AMP, através da identificação de um mecanismo enzimático da única di-adenilato ciclase de *Staphylococcus aureus* resistentes a metilina (MRSA). Nosso estudo esteve centrado no estabelecimento de protocolo de produção heteróloga das porções solúveis da SA_DacA, visando a obtenção de suas estruturas cristalográficas e o estudo de seu mecanismo enzimático para produção desta molécula. Resultados iniciais levaram à purificação em larga escala de uma construção de Sa_DacA e obtenção de cristais proteicos em diversas condições, sendo elas com e sem ligantes. A enzima mostrou-se ativa em ensaios enzimáticos, possuindo manganês como cofator. Ensaios de ligação do substrato e atividades enzimáticas, juntamente com mutações sítio dirigidas foram utilizados para análise da interface dimérica, do sítio ativo bem como do sítio de ligação do manganês, com a finalidade de se estudar o mecanismo enzimático da proteína. Ao final de nossas análises, os resultados gerados permitiram a elaboração de um modelo do mecanismo de ação da SA_DacA, sendo que esta proteína pode ser utilizada futuramente como base para criação de novas terapias contra a infecção de cepas super-resistentes de *Staphylococcus aureus*, uma vez que ela mostra ser essencial para uma das principais vias de sinalização desta bactéria.

Palavras-chave: *Staphylococcus aureus*. Di-adenilato ciclase. Mecanismo enzimático.

Referências:

- 1 CORRIGAN, R. M.; GRÜNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology**, v. 11, n. 8, p. 513-524, Aug. 2013.
- 2 CORRIGAN, R. M. et al. c-di-AMP is a new second messenger in *Staphylococcus aureus* with a role in controlling cell size and envelope stress. **PLoS Pathogens**, v. 7, n. 9, p. e1002217-1-e1002217-16, Sept. 2011.
- 3 WITTE, G. et al. Structural biochemistry of a bacterial checkpoint protein reveals diadenylate cyclase activity regulated by DNA recombination intermediates. **Molecular Cell**, v. 30, n. 2, p. 167-178, Apr. 2008.

PG117

Spontaneous symmetry breaking: Monte Carlo study comparing Metropolis and worm algorithm

MIGLORIA, A.¹; MENDES, T.¹

alexandre.migloria@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The study of symmetry is very important for the understanding of the Standard Model of particle physics, which describes the fundamental interactions between elementary particles.(3) This study includes especially the understanding of the cases in which there is symmetry breaking. First, we study theoretical examples of spontaneous symmetry breaking. Next, we relate the above theoretical study to practical examples of symmetry breaking in different areas of physics, as in gauge theories (Higgs mechanism), classical mechanics and statistical physics (spin models).(1) Finally, we make an application on the computer. In particular, we make a simulation of the two-dimensional Ising model, which explains the presence of spontaneous magnetization in ferromagnetic materials below the critical temperature, using the so-called Monte Carlo method.(2) This allows us generate a number of typical configurations for the system at a given temperature. We compare the traditional Metropolis algorithm and the more recent worm algorithm, which comes from a high-temperature expansion of the partition function.

Keywords: Monte Carlo method. Statistical physics. Ising model.

Referências:

- 1 SALINAS, S. R. **Introdução à física estatística**. São Paulo: EDUSP, 1999. 464 p.
- 2 GIORDANO, N. J. ; NAKANISHI, H. **Computational physics**. 2.ed. São Paulo: Pearson/Prentice Hall, 2006. 544 p.
- 3 GRIFFITHS, D. **Introduction to elementary particles**. 2nd ed. New York: Wiley-VCH, 2008. 454 p.

PG118

Nonlinear ellipse rotation measurements at the tightly focused laser beam condition

MIGUEZ, M. L.¹; BARBANO, E. C.¹; ZILIO, S. C.¹; MISOGUTI, L.¹

maria.miguez@usp.br, malumiguez@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Recently we proposed a new technique to determine the rotation of the elliptical nonlinear polarization (NER) with high precision using a dual phase lock-in amplifier. (1) Such new method has demonstrated good potential for studying nonlinear refractive index of materials due to high sensitivity, low noise and precision. The NER is a nonlinear refractive effect like self-focusing but, in a fundamental point of view, it depends on the origin of the different third-order nonlinear susceptibility, e.g. electronic. As we know, self-focusing effect is one of the most explored effects for material's optical nonlinearity determination, especially using the Z-scan technique. (2) In the present report we will present new results obtained with the NER technique with dual phase lock-in where multiple samples could be measured simultaneously in a single scan. In this case, a reference material can be added to one unknown material for calibration purposes avoiding the necessity of other measurements. This self referenced method allows better comparison among nonlinear materials because the nonlinearity signal of the reference and the unknown samples are simultaneously in the same measurements obtained with the same laser conditions. The NER setup is very similar to the one used for Z-scan, where nonlinear samples are translated along the focused beam axis. In order to distinguish two materials we have used Rayleigh range much shorter than sample thickness (tightly focused laser beam condition). An ultrafast laser pulse at 532 nm and 120 fs was used as excitation source. A quarter-waveplate was used to convert the linear polarization of the incident laser beam to the convenient elliptical polarization. Sandwich of silica with different optical glasses and a silica cuvette that containing the solvents to be analysed were used as samples. In all cases, silica was used for calibration. For instance, for liquids, the own cuvette made with silica gives the reference signal for nonlinear refraction determination. The advantage of using this configuration is given by the possibility of using the nonlinearity signal of silica, used as a reference, to evaluate the nonlinearity signal of the sample in the same scan. (3) The results are automatically obtained by comparing the silica with the sample. Such results demonstrate the potential of this NER method in the area of characterization of new materials with potential for applications in photonics. These results are important for the current stage of the project, where we want to ensure that the proposed technique is reliable.

Keywords: Nonlinearities. Femtosecond laser. Ellipse rotation.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. New simple method for measuring nonlinear polarization ellipse rotation with high precision using a dual- phase lock-in. **Proceedings of SPIE**, v. 8964, p. 89641C-1-89641C-5, 2014. doi: 10.1117/12.2037065.

2 SHEIK-BAHAE, M.; SAID, A. A.; WEI, T.; HAGAN, D. J.; STRYLAND, E. W. V. Sensitive Measurement of Optical Nonlinearities Using a Single Beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 24, n. 4, p. 760-769, 1990.

3 MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Refractive nonlinear index determination of different materials in a single measurement using nonlinear ellipse rotation. In: ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 37., 2014, Costa do Sauípe. **Resumos...** São Paulo: Sociedade Brasileira de Física, 2014. res. ID 237-1.

PG119

Structural and functional study of 10 fructosyltransferases from GH 32 and 68

MONSALVE, M. A. E.¹; MUNIZ, J. R. C.¹

alainmonsalve@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Fructosyl transferases hydrolyze and transfructosylate sucrose by cleaving the beta (1- 2) linkage and transferring the fructosyl group to an acceptor molecule such as sucrose, releasing glucose. (1) This reaction produces fructooligosaccharides (FOS) which are of increasing importance because their role in both human health- defense function, lipid metabolism, control of diabetes and anticancer activity(2)- and industry- used in foods, feeds, pharmaceutical and cosmetics industries as stabilizers, bulking agent and immunostimulating agents. (1) Despite the manifest importance of these enzymes, the structure of major of them is unknown and in several cases their function at molecular level is not well understood. The objective of this research is to characterize structurally and functionally 10 fructosyltransferases (GH 32 and 68). The 10 fructosyltransferases has been cloned in vector pETTRX joined to a His-Trx tag and expressed in E. coli Rosetta. The proteins will be purified by affinity and molecular exclusion chromatography and the optimum buffer for protein crystallization will be chosen using Thermo Fluor. The tridimensional structure of these enzymes will be solved by X-ray crystallography and their enzymatic activities will be determined. We hypothesize that we will be able to characterize these 10 fructosyltransferases using the techniques described above. Also, we think that the structure solved led us to a better understanding of the relation fructosyltransferase-sucrose and also to optimize it with future industrial interest.

Palavras-chave: Fructosyltransferase. Glycosyl hydrolase. Crystallographic structure.

Referências:

1 BELGHITH, K. S.; DAHECH, I.; BELGHITH, H.; MEJDOUB, H. Microbial production of levansucrase for synthesis of fructooligosaccharides and levan. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 50, n. 2, p. 451-458, 2012.

2 OLIVEIRA, A. J. B.; GONÇALVES, R. A. C.; CHIERRITO, T. P. C.; SANTOS, M. M.; SOUZA, L. M.; GORIN, P. A. J.; IACOMINI, M. Structure and degree of polymerisation of fructooligosaccharides present in roots and leaves of *Stevia rebaudiana* (Bert.) Bertoni. **Food Chemistry**, v. 129, n. 2, p. 305-311, 2011.

PG120

Validação de uma técnica em ressonância magnética nuclear para observar a migração de moléculas entre poros com características físico-químicas diferentes

MONTRAZI, E. T.¹; D'EURYDICE, M. N.¹; FORTULAN, C. A.²; BONAGAMBA, T. J.¹

elton.montrazi@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Engenharia de São Carlos - USP

As moléculas de um fluido num meio poroso encontram-se em constante movimento de translação nos poros. Observar a migração dessas moléculas de um poro para outro é muito interessante para análise das conectividades do meio, resultado importante para a prospecção de petróleo, qualidade de membranas filtros, entre outros. Se os poros apresentam distintos tempos de relaxações transversais (T_2) para os spins nucleares do fluido (ocorre quando os poros têm características físico-químicas diferentes - tamanhos diferentes, impurezas paramagnéticas ou composições químicas diferentes), um experimento possível para observar esse movimento de troca é o chamado $2D T_2 \times T_2$ Exchange proposto em 1993. (1) Esse experimento torna-se muito demorado quando se necessita fazer médias, porém o grupo adaptou o experimento para uma versão unidimensional ($1D T_2 \times T_2$ Exchange) onde se obtém as taxas de troca com grande ganho de tempo experimental. O objetivo desse trabalho é validar o experimento 1D proposto comparando ao 2D para um meio poroso artificial. A ideia para obter um meio poroso com duas distribuições de tamanhos de poros diferentes é a manufatura de uma cerâmica de alumina através do método de prensagem a seco e sinterização (realizada a 1500°C por 1h, suficiente para manter uma porosidade inter grãos de alumina denominada porosidade intrínseca) junto com o método de agente porogênico (cristais de sacarose selecionados por peneira são introduzidos durante a prensagem e depois durante a sinterização são degradados e volatilizados deixando os espaços que ocupavam vazio, tornando-se os poros chamados de induzidos). (2) O experimento $2D T_2 \times T_2$ Exchange consiste na combinação de dois trens de pulsos do tipo CPMG, separados por um tempo t_s onde a magnetização é armazenada na direção longitudinal e na qual contribui para observação do fenômeno de troca. (3) O resultado do experimento é um mapa de $T_2 \times T_2$ onde spins que apresentarem o mesmo tempo de relaxação em ambos os trens de pulsos CPMG vão aparecer como picos na diagonal do mapa e os que exibirem diferentes T_2 para cada CPMG vão aparecer como picos fora da diagonal. Com as cerâmicas saturadas com H_2O e num campo de 2T (85 MHz para núcleos de ^1H), foram obtidos os mapas $T_2 \times T_2$ para vários valores de t_s e então construídas as curvas de troca (totalizando 44h para obter os 67 pontos) da qual foi extraído o tempo característico de troca, $\tau_m = (30 \pm 6)\text{s}$. O experimento $1D T_2 \times T_2$ Exchange é similar a versão 2D, mas em vez de variar o número de π pulsos da primeira CPMG, é mantido constante para atuar como um filtro de T_2 . Escolhendo um filtro na qual é suprimido totalmente o pico de T_2 correspondente aos poros intrínsecos e variando t_s , foi possível observa a migração de spins do poro induzido para o intrínseco (4h para obter os 67 pontos) obtendo $\tau_m = (32 \pm 6)\text{s}$. A conclusão final é que os resultados obtidos para o meio poroso artificial manufaturado conseguiu validar o experimento 1D proposto como uma técnica mais rápida que o 2D trazendo informações sobre a conectividade.

Palavras-chave: RMN. Meios porosos. $T_2 \times T_2$ Exchange.

Referências:

1 LEE, J. H.; LABADIE, C.; SPRINGER JR., C. S.; HARBISON G. S. Two-dimensional inverse laplace transform NMR: altered relaxation times allow detection of exchange correlation. **Journal of the American Chemical Society** , v. 115, n. 17, p. 7761-7764, 1993.

2 SILVEIRA, Z. C.; NICOLETTI, R.; FORTULAN, C. A.; PURQUERIO, B.M. Ceramic matrices applied to aerostatic porous journal bearings: material characterization and bearing modeling. **Cerâmica**, v. 56, n. 338, p. 201-211, 2010.

3 DORTCH, D. R.; HORCH, E. A.; DOES, M. D. Development, simulation, and validation of nmr relaxation-based exchange measurements. **The Journal of Chemical Physics**, v. 131, n. 16, p. 164502, 2009.

PG121

Análise da distribuição de tempos de relaxação T_2 através do Método da Diagonalização Filtrada

MORAES, T. B.¹; MONTRAZI, E. T.¹; COLNAGO, L. A.²; BONAGAMBA, T. J.¹; MAGON, C. J.¹

tiago.moraes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

Um objetivo comum na análise experimental dos dados de decaimentos multi-exponenciais, como o caso dos sinais CPMG (sequência Carr Purcell Meiboom Gill), é a determinação dos tempos de relaxação, que, nos casos de sinais ruidosos, consistem em um problema matemático mal-posto. Através da utilização de métodos de regularização, esse problema é resolvido com a introdução de vínculos, como o conhecido parâmetro α da Transformada Inversa de Laplace. (1-2) Neste trabalho, estamos propondo a utilização do Método da Diagonalização Filtrada (FDM) para obtenção da distribuição de tempos de relaxação T_2 , oriundo de experimentos de CPMG na RMN e baixa resolução. O FDM e sua versão reduzida KBDM (Krylov Basis Diagonalization Method) tratasse de um método paramétrico (3), extensivamente utilizado na literatura para determinação de espectros de Fourier na Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de alta resolução em experimentos de 1 e 2 dimensões. Contrário a Inversão de Laplace, que gera uma distribuição contínua dos tempos de relaxação, o método do FDM retorna uma lista de valores discretos de T_2 . Através da implementação do FDM com *pseudo-noise averaging*, o resultado é um histograma com as possíveis soluções de *fitting* do sinal, que resulta na distribuição dos tempos de relaxação T_2 . De modo a avaliar o método proposto na determinação dos tempos de relaxação T_2 , dados experimentais de CPMG de baixa resolução (0,047, 0,47 e 0,26 Tesla) foram analisados, e extensivamente comparados com os obtidos com o algoritmo mundialmente popularizado de Inversão de Laplace (*non-negative least square*) NNLS-ILT, com regularização de Tikhonov e SVD (Singular Values Decomposition). Foram utilizadas para demonstração do método: soluções aquosas de $CuSO_4$, óleos, sementes, cerâmicas e as rochas porosas Sillurian, Indiana e Combfield. Resultados mostram que as informações extraídas pelo método do FDM são compatíveis com os obtidos nos métodos de Inversão de Laplace. Vantagens e desvantagens do método proposto é discutido, e métodos similares para experimentos bi-dimensionais $T_1 \times T_2$, $D \times T_2$ e $T_2 \times T_2$ estão em desenvolvimento.

Palavras-chave: Carr Purcell Meiboom Gill . Método de diagonalização filtrada. Inversão de Laplace.

Referências:

1 SONG, Y. Q. Magnetic Resonance of Porous Media (MRPM): a perspective. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 229, p. 12-24, 2013. doi: 10.1016/j.jmr.2012.11.010.

2 BORGIA, G. C.; BROWN, R. J. S.; FANTAZZINI, P. Uniform-penalty inversion of multiexponential decay data. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 132, n. 1, p. 65-77, 1998.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 MANDELSHTAM, V. A. FDM: the filter diagonalization method for data processing in NMR experiments. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 38, n. 2, p. 159-196, 2001.

PG122

Produção e estudos estruturais de heterocomplexos de Septinas

MORAIS, S. T. do B.¹; MACEDO, J. N. A.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹

br.sinara@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas que ligam GTP e interagem entre si formando heterocomplexos, os quais formam filamentos e estruturas de maior nível de organização. Tais filamentos, além de se mostrarem importantes durante a citocinese também podem estar envolvidos em outros processos celulares tais como determinação da polaridade celular e reorganização do citoesqueleto. Tipicamente, septinas apresentam três domínios estruturais compostos por um domínio central de ligação ao GTP flanqueado por um N-terminal variável e um C-terminal que pode conter sequências do tipo *coiled-coil*. Em humanos são encontrados 13 genes que codificam septinas, as quais se dividem em 4 grupos com base na similaridade de sua organização estrutural. Ainda pouco se sabe sobre a estrutura dessas proteínas, em particular dos heterocomplexos. O único complexo de septinas já caracterizado estruturalmente é formado pelas septinas 2, 6 e 7. (1) Análises filogenéticas realizadas por nosso grupo usando sequências de septinas pertencentes a diferentes organismos (2) levou a identificação de quatro septinas ortólogas no deuterostômio *Ciona intestinalis* as quais apresentam, cada uma delas, identidade com um dos quatro grupos de septinas descritos em mamíferos. (3) Assim, um dos objetivos desse trabalho está centrado na produção heteróloga das septinas de *C. intestinalis* visando estudos estruturais e bioquímicos, particularmente do possível heterocomplexo formado por estas proteínas. Para tanto, faz-se necessária a síntese das ORFs que codificam as quatro septinas de *C. intestinalis* visando a expressão e coexpressão das proteínas; purificação e estudos bioquímicos das proteínas e complexo, visando a avaliação da atividade GTPásica das proteínas recombinantes; realização de estudos biofísicos por meio da avaliação da estabilidade estrutural por técnicas de dicroísmo circular das subunidades e formação do heterocomplexo e ainda, ensaios de cristalização visando estudos estruturais comparativos com os demais complexos. Paralelamente, daremos continuidade aos estudos bioquímicos e biofísicos do heterocomplexo formado pelas septinas humanas 5, 7 e 8 já validado por nosso grupo. Nesse caso, objetivo será focado em análises da formação de filamentos pelo heterocomplexo e determinação da posição das proteínas utilizando microscopia eletrônica de transmissão, bem como em análises da capacidade desses filamentos interagirem com membranas ou sistemas biomiméticos de membrana. Finalmente, também será feita a coexpressão do complexo SEPT5/7/8 com a adição de SEPT3 para análise da possível formação de um octâmero.

Palavras-chave: Septinas. Coexpressão . Heterocomplexos.

Referências:

- 1 SIRAJUDDIN, M. et al. A structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.
- 2 ZERAIK, A. E. et al. . Septins of Platyhelminths: identification, phylogeny, expression and localization

among developmental stages of *Schistosoma mansoni*. **Plos Neglected Tropical Diseases**, v. 7, n. 12, p. e2602, 2014. .

3 CAO, L. et al. . Phylogenetic and evolutionary analysis of the septins protein family in metazoan. **FEBS Letters**, v. 581, n. 28, p. 5526-5532, 2007.

PG123

Endocitose das isoformas da pulchellina em células HeLa

MOREIRA, H. H. T. M.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹; SANDVIG, K.²

helinetm@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Oslo University

A pulchellina é uma glicoproteína heterodimérica do tipo RIP (ribosome inactivating protein) do tipo 2. Possui duas cadeias, sendo que a cadeia A é enzimaticamente ativa e capaz de remover uma adenina da porção 28S do rRNA; a cadeia B é uma lectina que se liga a resíduos de D-Galactose terminal presentes nos receptores de membrana. (1) A pulchellina é produzida em sementes de *Abrus pulchellus* sob diferentes isoformas, que diferem entre si em níveis de citotoxicidade. Das 4 dessas isoformas já caracterizadas (PI, PII, PIII, PIV), PII é a mais tóxica e a PIV a menos tóxica, mas ambas possuem atividade catalítica equivalente. A interação da cadeia B com os glicoreceptores de membrana e seu consequente processo de endocitose é crucial para que cadeia A tóxica entre na célula e possa atuar no seu sítio ribossomal. (2) No intuito de explorar o mecanismo de entrada celular da pulchellina, foram realizados experimentos com diversas drogas que atuam em diferentes rotas endocíticas e de translocação em células HeLa. O efeito das drogas na ligação e entrada nas células, bem como a habilidade das toxinas chegarem ao ribossomo foi avaliado medindo-se a inibição de síntese proteica em células HeLa, utilizando meio de cultura com [14C] leucina. A ligação e endocitose da toxina nas células pré-tratadas com as drogas foi monitorada medindo a quantidade das duas isoformas previamente marcadas com I125 (PII[I125] e PIV[I125]), que não pode ser lavada com solução PBS lactose 0.1M. A ligação da toxina a superfície celular foi efetuada incubando-se a pulchellina marcada em gelo, de forma a evitar a internalização da proteína. Os resultados de inibição de síntese proteica mostram que as células sofrem proteção contra o efeito tóxico da pulchellina na presença de brefeldina A, indicando que a pulchellina necessita ser transportada via Golgi para executar sua função. Inibidores de glicosilação como tunicamicina, swainsonine, puromicina e cicloheximidina sensibilizaram as células à pulchellina em 5.2, 6.2, 7.8, 48 vezes para PII, e 21.9, 52.4, 6.7, 60 vezes para IV, respectivamente. Os ensaios com puromicina e cicloheximida não afetaram a taxa de endocitose de ambas as isoformas, o que indica que a pulchellina na ausência dos inibidores compete no transporte ou processamento de glicoproteínas recém sintetizadas. Os experimentos de ligação e captação da pulchellina mostraram que PII apresenta 30% menos afinidade pela superfície de células HeLa que PIV, além disso, PII apresenta menor taxa endocítica comparada com PIV. Nas células incubadas com PDMP e neuraminidase, a pulchellina mostrou uma taxa endocítica reduzida comparada ao controle enquanto PII não se alterou, indicando que PIV pode necessitar de glicocomplexos contendo ácido siálico para se internalizar nas células testadas. Nos experimentos realizados com inibidores de dinamina (*dynasore*), ambas isoformas tiveram as taxas de endocitose aumentadas, mostrando um efeito compensatório para via endocítica independente de dinamina, o que sugere que a pulchellina é possivelmente internalizada nas células por duas vias, clatrina-dependente e independente de clatrina.

Palavras-chave: Pulchellina. Endocitose. Transporte intracelular.

Referências:

1 ARAÚJO, A.P.U; CASTILHO, P. V.; GOTO, L. S. Ribosome-inactivating proteins from *Abrus pulchellus*. In: LORD, J. M.; HARTLEY, M. R. (Ed.). **Toxic plant proteins**. Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. v. 18. p. 133-147. (Plant Cell Monographs).

2 CASTILHO, P. V.; GOTO, L. S.; ROBERTS, L. M.; ARAÚJO, A. P. U. Isolation and characterization of four type 2 ribosome inactivating pulchellin isoforms from *Abrus pulchellus* seeds. **FEBS Journal**, v. 275, n. 5, p. 948-959, 2008.

PG124

Photonic bandgaps and Lighthouse effect in ultracold strontium clouds

MORIYA, P. H.¹; SHIOZAKI, R. F.¹; COURTEILLE, Ph. W.¹

paulohisao@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Cooperative effects can affect the light scattered by atomic clouds even when diluted. For example, cooperative spontaneous emission can dramatically change the radiative pressure exerted by a far-detuned laser beam exciting the atoms. (1) It can also lead us to a full understanding and controlling of many phenomena in light-matter interaction, in which the microscopic structure is crucial as, for example, Abraham-Minkowski dilemma, subradiance and localization of light. Due to the important role of this force in trapping and optical cooling techniques and atomic manipulation by lasers, it is quite surprising that this kind of effect has only been observed recently. (2) Another great potential of these techniques may reside in ordered configurations, such as optical lattices, that in certain regimes is expected to reach photonic bandgaps (PBG). (3) In order to investigate these phenomena, strontium is a good choice due to its ideal structure for cooling until ultralow temperatures. With these ideas in mind, we will use our strontium experiment where we can obtain cold and ultracold atomic clouds via ordinary magneto-optical traps. These atoms can be ordered in different configurations creating perfect photonic crystals. We expect as well to obtain new interesting results and review some phenomena in the point of view of collective effects as subradiance, localization of light, atomic lighthouses, Bragg scattering in optical lattices and PBG.

Keywords: Atomic physics. Photonic bandgaps. Collective effects.

Referências:

- 1 COURTEILLE, Ph.W. et al. Modification of radiation pressure due to cooperative scattering of light. **European Physical Journal D**, v. 58, n. 1, p. 69-73, 2010.
- 2 BIENAIME, T. et al. Observation of a cooperative radiation force in the presence of disorder. **Physical Review A** v. 104, n. 18, p. 183602, 2010.
- 3 YU, D. Photonic band structure of the three-dimensional ⁸⁸Sr atomic lattice. **Physical Review A** , v. 84, n. 4, p. 043833, 2011.

PG125

Expressão em fungo filamentososo e caracterização bioquímica e estrutural da endoglucase de *Aspergillus terreus*

MULINARI, E. J.¹; SEGATO, F.²; BERNARDES, A.¹; MUNIZ, J. R. C.¹

evandro.mulinari@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Engenharia de Lorena - USP

A crescente preocupação em relação ao aumento dos preços dos combustíveis, as emissões de gases causadores do efeito estufa e, principalmente, a escassez de petróleo, vem fortalecendo cada vez mais o interesse por tecnologias que visam à obtenção sustentável de energia, como a geração de combustíveis e outros derivados a partir de fontes renováveis. Neste contexto, o conceito de biorrefinaria desponta como uma opção promissora em diversos segmentos, por ser baseada exclusivamente na conversão de matérias-primas originárias da biomassa. Os materiais lignocelulósicos são abundantes e disponibilizam na biosfera uma energia estocada e a baixo custo. A conversão da biomassa em açúcares simples, no entanto, é um processo lento e intrincado, devido sobretudo à recalcitrância e a complexa heterogeneidade dos polímeros que formam a parede celular dos vegetais. A biomassa lignocelulósica deve passar por um intensivo processo de pré-tratamento após o qual, enzimas devem ser utilizadas para degradar os polissacarídeos da parede celular em açúcares simples susceptíveis à fermentação e produção de bioetanol de segunda geração. Objetivando explorar a utilização dos polissacarídeos que compõem a parede celular como fonte renovável para a produção de biocombustíveis e outros bio-derivados, um repertório complexo de enzimas hidrolíticas faz-se necessário. (1) O objetivo deste trabalho é contribuir com o conhecimento das diferentes propriedades catalíticas e estruturais envolvidas nas diferentes enzimas endoglucanases da família GH12 que, junto com as exoglucanases e as betaglucosidades, compõem o conjunto de enzimas responsáveis pela degradação completa da matéria lignocelulósica. A caracterização da endoglucanase de *Aspergillus terreus* da família GH12 foi abordada com a obtenção da enzima pura através de ferramentas de biologia molecular para a expressão heteróloga em fungo filamentososo (pEXPYR; *A. nidulans*). (2) A enzima foi submetida a ensaios bioquímicos que julgaram sua atividade catalítica frente a diferentes condições reacionais e a técnica de Thermofluor (3) foi empregue visando a otimização do processo de cristalização. O sucesso desses estudos darão sua contribuição para que o Brasil se firme como um líder na produção de bioenergia sustentável e amigável ao meio ambiente.

Palavras-chave: Bioetanol. Fungo. Thermofluor.

Referências:

1 LYND, L. R. et al. How biotech can transform biofuels. **Nature Biotechnology**, v. 26, n. 2, p. 169-72, 2008.

2 SEGATO, F. et al. High-yield secretion of multiple client proteins in *Aspergillus*. **Enzyme and**

Microbial Technology, v. 51, n. 2, p. 100-6, 2012.

3 ERICSSON, U. B. et al. Thermofluor-based high-throughput stability optimization of proteins for structural studies. **Analytical Biochemistry**, v. 357, n. 2, p. 289-98, 2006.

PG126

Evaluation of a volume- and charge-based solvation function on molecular docking

MUNIZ, H. S.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

heloisa.muniz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The improve on the computational power and the increasing number on protein structures allows us more and more exploring molecular interaction tools such docking. Describing functions tend to be further robust, so, crystallized water between active site and ligands plus a pursuit for a complete description for that system, demand a reasonable solvation model. Because explicit water molecule model is yet not time-allowed on virtual screening and large data sets, molecular docking programs has implicit or another models. The state of art is the Generalized Born (GB) continuum model (1), that mainly try to reproduce the dielectric medium, but it is still computationally slow. Than, most of the current models are based on a penalty for polar interactions based on the solvent occluded volume after binding. But yet, how well that last models describes these contributions? Here, we used a empirical solvation method implemented on LiBELa molecular docking program to compare with standard models such GB/SA. It is based on Stouten-Verkhivker's model (2) and rules that the solvation energy has a volume (f) and a electrostatic term (S) quadratic as function the charge (q). These terms are computed for ligand and protein (i and j) and than molded by a envelop function, resulting on the energy function $E_{ij}^{sol} = (S_i f_j + S_j f_i) \exp[-r_{eff}^2/2\sigma^2]/3\sigma^3$ and $S_i = \alpha q_i^2 + \beta$. Energies for ligand-receptor complex from SB2010 database were computed through DOCK6 (Zou's pairwise GB/SA) and LiBELa programs. The initial conformation was maintained, so the pose was the same for both calculations. Good accordance between then suggests that this model can be a great approximation for a faster evaluation on solvent polar contribution. Evaluation through LiBELa have shown that the enrichment is worse when using additional solvation function instead of solely van der Waals and Coulombic electrostatic contribution. Adjusted log AUC values were computed for DUD benchmarking. (3) Pure force field scoring functions had 70% greater values than when accounting for solvation. Moreover, the attenuated scoring function still had 80% greater log AUC values when computed without the solvation term. Stouten-Verkhivker's solvation model here evaluated is in accordance with the well established Zou's GB/SA. Also, it has a much lower computational time (10% or less), proving to be good utility in programs such as molecular docking. Despite the additional solvation term be a improvement on ligand-receptor interactions theory, it has showed a mean worsening on ROC enrichment. This is also found by Shoichet when testing DUD with and without solvation contribution. (3)

Keywords: Volume-based solvation model. Ligand docking. Pose rescoring.

Referências:

1 STILL, W. C. et al. Semianalytical treatment of solvation for molecular mechanics and dynamics. **Journal of the American Chemical Society**, v. 112, n. 16, p. 6127-6129, 1990.

2 VERKHIVKER, G. M. et al. Towards understanding the mechanisms of molecular recognition by computer simulations of ligand-protein interactions. **Journal of Molecular Recognition**, v. 12, n. 6, p. 371-389, 1999.

3 MYSINGER, M. M.; SHOICHET, B. K. Rapid context-dependent ligand desolvation in molecular docking. **Journal of Chemical Information and Modeling**, v. 50, n. 9, p. 1561-1573, 2010.

PG127

Evolução temporal de quase-partículas

NARDI, L. M. C.¹; OLIVEIRA, L. N.¹

luh_nardi@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT), desenvolvida a partir dos trabalhos de Hohenberg e Kohn,(1) em 1964, os quais demonstraram que existe uma relação bi-unívoca entre a densidade e a função de onda do estado fundamental de um sistema com número arbitrário de elétrons, e de Kohn e Sham,(2) os quais desenvolveram um procedimento para calcular a densidade e a energia do estado fundamental, oferece uma alternativa precisa e computacionalmente barata para estudar sistemas eletrônicos não-homogêneos. A abordagem proposta por Kohn e Sham (2) tem tido grande impacto na física da matéria condensada. Em 1984, Runge e Gross(3) estenderam o escopo da DFT para descrever a evolução temporal da densidade, por meio do teorema de Runge-Gross.(3) Assim surgiu a TD-DFT (time-dependent density functional theory), que permite descrever sólidos sujeitos a perturbações dependentes do tempo. Na prática, a TD-DFT divide o eixo do tempo em intervalos (cujo tamanho define a precisão do cálculo numérico), e a cada um dos instantes resultantes usa o procedimento de Kohn e Sham (2) para determinar a densidade eletrônica. Para conectar instantes subsequentes, o procedimento usa o algoritmo de Crank-Nicholson, que oferece uma representação numérica precisa do operador de evolução temporal. O objetivo deste trabalho é usar TD-DFT para estudar a evolução temporal da densidade eletrônica de um metal no qual um buraco é formado por meio de fotoemissão,. Queremos calcular a taxa de fotoemissão e comparar os resultados com dados experimentais e curvas teóricas obtidas de modelos simples.

Palavras-chave: Sistemas. Matéria condensada. TD-DFT.

Referências:

1 HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. **Physical Review B**, v.136, n.3, p.864, 1964.

2 KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. **Physical Review**, v.140, p.A1133, 1965.doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>.

3 RUNGE, E.; GROSS, E. K. U. Density-functional theory for time-dependent systems. **Physical Review Letters**,v.52, p.997, 1984.doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.52.997>.

PG128

Hidden symmetries, compass model, and Majorana fermions in frustrated magnetic insulators with strong spin-orbit interactions

NATORI, W. M. H.¹; PEREIRA, R. G.¹

wmhnatori@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Quantum spin liquids (QSLs) are materials that do not show magnetic long-range order down to $T=0K$, in spite of being modeled by strong spin-spin interactions. The concept of QSL originally arose from the study of Mott insulators in geometrically frustrated lattices. Research interest in these systems was further increased by the discovery that QSLs sustain "topological orders", a concept that goes beyond the symmetry-breaking paradigm of Condensed Matter Physics. The existence of such materials is supported by experiments, such as the observation of fractionalized excitations in the neutron scattering spectrum of the compound herbertsmithite (1). It was also shown that the ground state of Kitaev's model (2), which is exactly solved through the use of Majorana fermions, is a QSL. Such experimental and theoretical progress came together with the study of a variety of mechanisms that originate a QSL phase like anisotropic exchange interactions, coupling with orbital degrees of freedom and strong spin-orbit interactions. All of them are present in the spin-orbital model (SOM) in the FCC lattice (3). A remarkable feature of this model is the presence of a hidden $SU(2)$ -symmetry which favors the appearance of a QSL phase in certain regions of the parameter space. In our work, we have shown that the SOM can be explicitly rewritten in terms of the $SU(2)$ operators, together with 120° -compass-model operators. We will show the benefits of using such representation in dealing with this model, such as making the hidden symmetry explicit as well as the mechanisms by which it could be broken, reinterpreting the mean-field states proposed in, (3) present connections with other works on models that consider both spin and orbital degrees of freedom and facilitating the use of a Majorana fermion representation to the hamiltonian.

Keywords: Quantum spin liquids. Majorana fermions. Strongly correlated systems.

Referências:

- 1 HAN, T.-H. et al. Fractionalized excitations in the spin-liquid state of a kagome-lattice antiferromagnet. *Nature*, v. 492, p. 406-410, 2012. doi:10.1038/nature11659.
- 2 KITAEV, A. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals of Physics*, v. 321, n. 1, p. 2-111, 2006.
- 3 CHEN, G.; PEREIRA, R. G.; BALENTS, L. Exotic phases induced by strong spin-orbit coupling in ordered double perovskites. *Physical Review B*, v. 82, n. 17, p. 174440, 2010.

PG129

Characterization of a fluorescence lifetime spectroscopy system for diagnostic purposes using an optic fiber probe

NOGUEIRA, M. S.¹; D'ALMEIDA, C. P.¹; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹

marcelo.saito.nogueira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The fluorescence lifetime spectroscopy in biological tissues has been presented as a technique of great potential for tissue characterization for diagnostic purposes. One of the main advantages of optical fluorescence techniques for diagnosis is the possibility of evaluating the tissue metabolism *in situ*, without removal and processing of the biological sample. The most commonly monitored fluorophores are NADH (nicotinamide adenine dinucleotide) and FAD (flavin adenine dinucleotide), biomolecules involved in cellular respiration that may provide information on the metabolism of the cell. (1-2) The aim of this study is to characterize a steady-state fluorescence spectroscopy and fluorescence lifetime system for clinical diagnostic purpose and characterization of the NADH and FAD fluorescence for different skin types and skin alterations in the analyzed tissues. In the system, optical fibers are used for both light delivery to the tissue and collecting the fluorescence at the surface of the sample. The fluorescence lifetime is determined by excitation of NADH and FAD with two lasers, one emitting at 378 nm and the other at 445 nm. An optical filter is used to remove the backscattered laser light before the detector. The photodetector is a hybrid photomultiplier tube virtually free of the after-pulsing effect, which may interfere with the fluorescence lifetime measurement. In order to count photons and determine the fluorescence decay curve, the Time Correlated Single Photon Counting (TCSPC) technique is used. For the steady-state fluorescence spectroscopy, the collection fiber can be directly connected to an Ocean Optics USB2000-FLG portable spectrometer. The fluorescence spectroscopy with excitation at 378, 405 and 445 nm is used to evaluate the redox rate and for the analysis of proportions of free and bound NADH and FAD free and bound. The temporal resolution of the system was obtained by the detector response function measurements and the spectrum and fluorescence lifetime of a standard fluorescent molecule for calibration of the system was measured. A temporal broadening of about 250 ps was measured using a scattering medium. The average lifetime of rhodamine was (4.1 ± 0.3) ns, which matches with the fluorescence lifetimes values in the literature and indicates that the system is well calibrated. It was also measured lifetimes of photosensitizers Photogem and Chlorin E6 in two different concentrations, for references for future measurements in biological tissue. The measured fluorescence lifetimes were of (11.0 ± 0.3) ns and (4.0 ± 0.3) ns, for Photogem and Chlorin, respectively. In the future, the system will be used for measurements in skin lesions.

Keywords: Fluorescence. Lifetime. Diagnostic.

Referências:

1 SKALA, M. C.; RICHING, K. M.; GENDRON-FITZPATRICK, A.; EICKHOFF, J.; ELICEIRI, K. W.; WHITE, J. G.; RAMANUJAM, N. In vivo multiphoton microscopy of NADH and FAD redox states,

fluorescence lifetimes, and cellular morphology in precancerous epithelia. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 104, n. 49, p.19494-19499, 2007.

2 SKALA, M. C.; RICHING, K. M.; BIRD, D. K.; GENDRON-FITZPATRICK, A.; EICKHOFF, J.; ELICEIRI, K. W.; KEELY, P. J.; RAMANUJAM, N. In vivo multiphoton fluorescence lifetime imaging of protein-bound and free nicotinamide adenine dinucleotide in normal and precancerous epithelia. **Journal of Biomedical Optics**, v. 12, n. 2, p. 24014-1 - 24014-10, 2007.

PG130

Imaging the liquid/vapor interface of acetonitrile/water mixtures using sum frequency generation microscopy.

OITICICA, P. R. A.¹; MIRANDA, P. B.¹

praoitica@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Acetonitrile is a widely used in liquid chromatography, organic synthesis, and electrochemistry. (1) This molecule is composed by a methyl hydrophobic group and a high polar cyanide group. Although acetonitrile contains a polar group that accepts hydrogen bond and a hydrophobic group, it is not typically thought as an amphiphilic molecule. Nevertheless experiments and simulations (2-3) have shown that the interface properties of acetonitrile differ significantly from the bulk. Sum Frequency Generation spectroscopy (SFG) was previously used to investigate the liquid/vapor (LV) interface of mixed acetonitrile/water solutions. We observed that the SFG signal grows between 0 and 0.2 acetonitrile molar ratio, and the signal is maximum near 0.1 acetonitrile molar ratio. Above 0.2 acetonitrile molar ratio the SFG signal decrease until the value expected for the pure acetonitrile. These observations indicate that a change in interface structure of the solution may occur between 0.1 acetonitrile molar ratio. To obtain more detailed information of the LV interface of mixed acetonitrile/water solutions, we perform imaging of this interface using Sum Frequency Generation Microscopy. This technique consist of perform optical microscopy with the SFG signal. Our results show that the SFG signal becomes less spatially uniform and vary on the time randomly in the LV interface when the acetonitrile bulk concentration is near the same concentration where the SFG signal reaches the maximum. By using SFG microscopy we can investigate the interfacial properties and the organization structure in a more detailed way because the SFG signal is surface specific and only can be originated from the interface of the liquid. The and random and non-uniform distribution of the SFG signal detected can be imagined as that the acetonitrile molecules cover the surface of the aqueous solution forming acetonitrile rich regions rather than a uniform layer.

Keywords: Acetonitrile. Liquid-vapor interface. Sum frequency generation.

Referências:

- 1 HENRY, M. C.; PIAGESSI, E. A.; ZESOTARSKI, J. C.; MESSMER, M. C. Sum-frequency observation of solvent structure at model chromatographic interfaces: acetonitrile-water and methanol-water systems. **Langmuir**, v. 21, n. 14, p. 6521-6526, 2005.
- 2 RIVERA, C. A.; BENDER, J. S.; MANFRED, K.; FOURKAS, J. T. Persistence of acetonitrile bilayers at the interface of acetonitrile/water mixtures with silica. **Journal of Physical Chemistry A** v.117, n. 46, p. 12060-12066, 2013.
- 3 RAO, Y.; TURRO, N. J.; EISENTHAL, K. B. Water structure at air/acetonitrile aqueous solution interfaces. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 113, n. 32, p. 14384-14389, 2009.

PG131

Projeto: “Caracterização molecular de *Staphylococcus aureus* resistentes à meticilina (MRSA) isolados de infecção de um hospital em São Carlos”

OKADO, J. B.¹; CAMARGO, I. L. B. C.¹

jessica.okado@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Staphylococcus aureus são cocos gram-positivos que colonizam principalmente narinas, e, menos comumente, outras regiões. É grande causador de infecções cutâneas, simples e graves; além de osteomielite, bacteremia, sepse, impetigo, carbúnculo e síndrome do choque tóxico. (1) Possui potencial de resistência a todas as classes de antimicrobianos, sendo de especial importância, linhagens resistentes à meticilina (MRSA) e outros beta-lactâmicos. O aparecimento recente de níveis de resistência à vancomicina (hVISA, VISA, VRSA) é preocupante, uma vez que é usado como antimicrobiano de última escolha para tratamento de MRSA. (2) As linhagens de *S. aureus* tornam-se resistentes à meticilina devido à presença do gene *mecA* ou *mecC*, contidos no elemento genético *Staphylococcal cassette chromosome, SCCmec*, dividido hoje em onze tipos. *S. aureus* é capaz de formar biofilme e produzir uma série de moléculas e toxinas que ajudam no processo inflamatório e são secretadas pela maior parte de linhagens, variando quais tipos de toxina cada uma é capaz de produzir. A formadora de poros, Leucocidina Pantone Valentine (PVL) é associada a necrose tecidual. Genes de virulência, toxinas e resistência podem estar contidos em Elementos Genéticos Móveis, tais como plasmídios, que são estruturas dinâmicas e plásticas, com funções específicas para manutenção da bactéria, como replicação, estabilidade e controle de cópias, além de transferência, patogenicidade e funções de resistência. O tamanho dos plasmídios pode variar bastante, por eventos de integração e deleção de pares de bases. A facilidade de serem modificados faz com que a comparação de plasmídios seja difícil. Para isso, tipos diferentes de plasmídios em estafilococos foram divididos famílias. (3) A caracterização do perfil molecular, de produção de toxinas e de sensibilidade, permite conhecer o padrão de linhagens de MRSA presente no ambiente hospitalar ou disseminado entre os pacientes e profissionais de saúde. Este projeto visa o estudo de 42 amostras de MRSA isoladas de hemocultura, ponta de catéter e secreção traqueal de pacientes de um hospital de São Carlos, que representam 85,7% dos isolados de *S. aureus* neste hospital, de 2011 a 2012. Os objetivos do trabalho são: 1. Traçar perfil de sensibilidade por método de microdiluição, seguindo CLSI; 2. Detectar presença de hVISA (Hiramatsu *et al.*, 1997) 3. Investigar, por PCR, se há presença do gene para produção de PVL segundo Lina *et al* (1999); 4. Caracterização dos elementos *SCCmec* por multiplex PCR (Kondo *et al.*, 2007); 5. Tipagem molecular por Eletroforese em campos pulsados (do inglês, *Pulsed Field Gel Electrophoresis*, PFGE), segundo Tenover; 6. Tipagem por sequenciamento Multilocus (do inglês, *Multilocus Sequence Typing*, MLST) para cada pulstipo dado por PFGE; 7. Determinação do padrão de hemólise em sangue de carneiro; 8. Determinação de perfil de virulência por método de PCR segundo Jarrau *et al.* (2002) e Sapri *et. al* (2011). 9. Determinação de produção de biofilme, por método a ser determinado. 10. Determinação de família de plasmídios contidos nas amostras (3). A partir deste trabalho, será possível determinar se há ou não disseminação de uma linhagem neste hospital e o perfil de MRSA presente nestes pacientes.

Palavras-chave: MRSA. Epidemiologia molecular. Perfil de sensibilidade.

Referências:

- 1 GORDON, F. J.; LOWY, F. D. Pathogenesis of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* infection. **Clinical Infection Diseases**, v. 46, p. S350-S359, 2008. Supplement 5.
- 2 CHAMBERS, H. F.; DELEO, F. R. Waves of resistance: *Staphylococcus aureus* in the antibiotic era. **Nature Reviews Microbiology**, v. 7, n. 9, p. 629-641, 2009.
- 3 JENSEN, L. B. et al. A classification system for plasmids from enterococci and other Gram-positive bacteria. **Journal of Microbiological Methods**. v. 80, n. 1, p. 25-43, 2010.

PG132

Aplicação da técnica de engenharia de reservatórios na teoria do laser

OLIVEIRA NETO, F.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

foliveiraneto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A técnica da engenharia de reservatórios foi proposta em 1996 (1) visando a proteção de estados quânticos contra os efeitos do meio ambiente, nos contextos das armadilhas iônicas e da eletrodinâmica quântica de cavidades. (2) No caso específico da engenharia de reservatórios, a técnica consiste em fazer com que o sistema de interesse (cujo estado deseja-se proteger), interaja de uma forma específica com outro sistema quântico auxiliar, também dissipativo. Da engenharia dessa interação, sob um regime específico de parâmetros, decorre então um liouvilliano efetivo, responsável por perdas efetivas do sistema de interesse mediadas pelo sistema auxiliar. A competição desse liouvilliano "artificialmente" produzido com o liouvilliano que decorre da ação natural do meio ambiente sobre o sistema é que consiste na engenharia de reservatórios. Neste trabalho pretendemos aplicar a técnica da engenharia de reservatórios na teoria do laser, (3) na qual a ação do meio ambiente torna-se crucial para a construção de um estado estacionário, que decorre da competição entre os mecanismos naturais de dissipação de um modo da cavidade e o bombeamento deste modo através da sua interação, por exemplo, com uma amostra atômica. A engenharia de mecanismos efetivos de dissipação do modo, via engenharia de reservatórios, parece então ser uma questão de interesse, dado que pode potencialmente acarretar estados estacionários outros que aquele da distribuição poissoniana da luz laser. Em síntese, pretendemos então utilizar a técnica da engenharia de reservatórios no âmbito da teoria do laser, com o objetivo de produzir estados estacionários do campo, via competição dissipação-amplificação, outros que aquele da luz laser.

Palavras-chave: Laser. Engenharia de reservatório. Ótica quântica.

Referências:

1 POYATOS, J. F. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 23, p. 4728-4731, 1996 .

2 PRADO, F. O.; ALMEIDA, N. G.; DUZZIONI, E. I.; MOUSSA, M. H. Y.; VILLAS-BOAS, C. J. Decoherence-free evolution of time-dependent superposition states of two-level systems and thermal effects. **Physical Review A**, v. 84, n. 1, 012112, 2011.

3 SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, M. S. **Quantum optics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

PG133

Modelagem comparativa da enzima benzoato CoA ligase (BCL) de *Xanthomonas albilineans*: alvo molecular para o desenvolvimento de novos agroquímicos.

OLIVEIRA, A. A.¹; GUIDO, R. V. C.¹

andrewalberttt@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A escaldadura das folhas é uma das cinco maiores doenças encontradas em culturas de cana-de-açúcar. É causada pela bactéria gram-negativa *Xanthomonas albilineans* (Ashby) Dowson, sendo encontrada e distribuída em todas as regiões do mundo onde a cana-de-açúcar é cultivada. (1) Suas consequências são: diminuição da produtividade, necessidade de reforma precoce dos canaviais e queda de qualidade do caldo extraído, o que gera prejuízos econômicos significativos para os agricultores. No Brasil, sua importância e impacto econômico têm sido prejudicados devido a dificuldades no diagnóstico, uma vez que os sintomas se assemelham a outras fitopatologias (e.g., raquitismo das soqueiras). A bactéria *X. albilineans* produz uma família de antibióticos e fitotoxinas conhecida como albicidinas. As características únicas da via de biossíntese de albicidinas em *X. albilineans* fazem das enzimas dessa rota metabólica alvos importantes para o planejamento racional de inibidores enzimáticos. Entre as enzimas dessa via, destaca-se a benzoato-CoA ligase (XaBCL - EC 6.2.1.25). A XaBCL é responsável pela formação de ligações carbono-enxofre. Neste trabalho, o método de modelagem comparativa foi empregado para a construção de um modelo estrutural 3D robusto e representativo da enzima XaBCL. (2) A sequência da enzima BCL foi obtida no servidor Uniprot sob o código A1EAJ3. A primeira etapa do processo de modelagem foi a identificação de proteínas homólogas com estrutura 3D disponível para ser utilizada como molde. Nesse sentido, foi identificada a BCL de *Burkholderia xenovorans* (PDB ID, 2V7B) com 30% de identidade sequencial. Para a construção do modelo 3D, utilizou-se o programa Modeller 9.12, e a interface ViTAMIn (desenvolvida em nosso laboratório). No total, foram gerados e avaliados 200 modelos. Os critérios para seleção do melhor modelo incluíram a análise da qualidade dos modelos construídos, menor pontuação energética DOPE e parâmetros estereoquímicos adequados para os ângulos de torção phi e psi. A análise estrutural do melhor modelo indicou a presença de dois domínios alfa/beta (domínios N- e C-terminal), os quais estão separados por uma região de dobradiça que apresenta um enovelamento do tipo barril beta torcido. O desvio quadrático médio entre os carbonos alfa da estrutura molde e do melhor modelo construído foi de 0,6 Å, sugerindo elevada semelhança na topologia entre as proteínas homólogas. Uma etapa de validação adicional do modelo 3D de XaBCL foi realizada com metodologia de docagem molecular, a qual consistiu na reprodução com sucesso do modo de ligação cristalográfico do substrato natural. A construção do modelo tridimensional é fundamental para a aplicação de métodos de planejamento baseado em estruturas. Um modelo representativo de XaBCL foi construído e validado utilizando-se como molde a estrutura cristalográfica da enzima homóloga de *B. xenovorans*. Esse modelo será extremamente útil para a identificação dos determinantes estruturais responsáveis pelo reconhecimento molecular e para a descoberta e planejamento de inibidores da enzima alvo. É importante salientar que ensaios experimentais (e.g., clonagem, expressão e purificação e cristalização) encontram-se em andamento para a determinação da estrutura 3D por cristalografia de raios-X e dos

parâmetros cinéticos de atividade da XaBCL.

Palavras-chave: Modelagem comparativa. *Xanthomonas albilineans*. Benzoato.

Referências:

1 MENSI, I. et al. First report of sugarcane leaf scald in gabon caused by a highly virulent and aggressive strain of *Xanthomonas albilineans*. **Plant Disease**, v. 97, n. 7, p. 988-989, 2013.

2 SALI, A.; BLUNDELL, T. L. Comparative protein modelling by satisfaction of spatial restraints. **Journal of Molecular Biology**, v. 234, n. 3, p. 779-815, 1993.

PG134

Desenvolvimento de técnica de alinhamento óptico de um telescópio TMA

OLIVEIRA, A. O.¹; SCADUTO, L. C. N.¹; CASTRO NETO, J. C. de²

andre.orlandi.oliveira@usp.br

¹Opto Eletrônica S.A.

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Sistemas embarcados em satélites sofrem grandes cargas de lançamento e altas variações de temperatura quando em órbita, o que pode afetar drasticamente o desempenho do sistema se este não for robusto quanto a desalinhamentos. Muitos estudos já foram realizados no caso do alinhamento de sistemas telescópicos com dois espelhos e, na prática, quando desalinhados, esses sistemas apresentam coma no *field* central. No processo de alinhamento, busca-se reduzir ou eliminar esse coma no *field* central através do descentro ou inclinação do espelho secundário em relação ao primário. Contudo, na última década, através da teoria nodal de aberrações, foi constatado que este procedimento não é completo e que o sistema continuará apresentando baixo desempenho nos *fields* extremos. (1) Em um TMA (*Three Mirror Anastigmat Telescope*), assim como em um sistema com dois espelhos, o surgimento de um termo de coma no eixo óptico também caracteriza a presença de desalinhamentos no sistema óptico. Além disso, a teoria nodal de aberração prevê o surgimento de um termo adicional de astigmatismo linear (*field-asymmetric, field-linear 3rd order astigmatism*). Notavelmente, de forma geral, este novo termo de aberração permanece centrado no eixo óptico, podendo ocasionar a permanência de elementos desalinhados no sistema se este for alinhado apenas utilizando os dados obtidos no eixo óptico do sistema. (2) Por isso, propõe-se a fabricação de um TMA e o desenvolvimento de uma técnica de alinhamento realizada por meio de medidas no eixo óptico e fora do eixo óptico, buscando discriminar os efeitos causados por desalinhamentos no sistema, que deverão ser mitigados, garantindo o correto alinhamento. Vale destacar que o desalinhamento, responsável pela perda da simetria rotacional do sistema, gera os mesmos tipos de aberrações já conhecidos, isto é, nenhuma nova aberração é gerada. Contudo, o que muda é a dependência com o campo de alguns termos de aberrações. Coma e astigmatismo são afetados quando desalinhamentos estão presentes num sistema TMA, que por definição são corrigidos para coma e astigmatismo de terceira ordem. (2)

Palavras-chave: Three mirror anastigmat telescope. Alinhamento óptico. Aberrações de Seidel.

Referências:

1 SCHMID, T.; THOMPSON, K.; ROLLAND, J. Alignment of two mirror astronomical telescopes (the astigmatic component). **Proceedings of the SPIE** v. 7017, p.70170C, 2008.doi:10.1117/12.791263.

2 SCHMID, T; THOMPSON, K; ROLLAND, J. Alignment induced aberration fields of next generation telescope. **Proceedings of the SPIE** v. 7068, p.70680E, 2008.doi: 10.1117/12.797143.

PG135

Refratômetro diferencial para medida simultânea de Brix e sacarose

OLIVEIRA, A. R.¹; DOMENEGUETI, J. F. M.¹; ZILIO, S. C.¹

anderson.roberto.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho apresentamos uma técnica totalmente nova para a medida da rotação da polarização da luz por uma substância que possui atividade óptica. O sistema utiliza somente um led, dois polarizadores, um prisma de vidro semi cilíndrico, uma cubeta, uma CCD e um computador para análise de dados. Luz proveniente do led passa pelo primeiro polarizador, cujo eixo se encontra a 45° , e incide no prisma pelo lado semi cilíndrico, ocorrendo reflexão na base do prisma aproximadamente no ângulo crítico. A luz refletida passa então pela cubeta e depois por um analisador, cujo eixo se encontra paralelo ao primeiro polarizador, e então o sinal é captado pela CCD. Quando a cubeta é preenchida com água, observa-se na CCD uma interferência destrutiva exatamente no ângulo crítico (1) caracterizado por um mínimo de intensidade nesse ângulo (2). Se uma substância opticamente ativa é utilizada para preencher a cubeta, a posição desse mínimo é alterada dependendo do grau de rotação da polarização imposto pela substância. Uma calibração é necessária e pode ser feita utilizando-se soluções de concentração conhecida de sacarose ou frutose, por exemplo. O aparato obtido foi utilizado para medir concentração de soluções de sacarose e frutose e apresenta uma resolução de 0,001 g/ml ou aproximadamente 0,1% (m/m). Este dispositivo pode ser utilizado na indústria sucroalcooleira para a medida da quantidade de açúcar em cana e também na indústria farmacêutica para a identificação de substâncias opticamente ativas destróginas ou levóginas.

Palavras-chave: Ângulo crítico. Polarimetria. Reflexão total interna.

Referências:

1 KUKHARCHIK, P. D.; SERDYUK, V. M.; TITOVITSKII, I. A. Total internal reflection of a Gaussian light beam. **Technical Physics**, v. 44, n. 4, p.417-421, 1999.

2 ZILIO, S.C. A simple method to measure critical angles for high-sensitivity differential refractometry. **Optics Express**, v. 20, n. 2, p. 1862-1867, 2012.

PG136

Optical technique for evaluation and control of the chemical and microbiological process during yeast production

OLIVEIRA, B. P.¹; MORIYAMA, L. T.¹; BAGNATO, V. S.¹

b.p.oliveira@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The production of fuel ethanol in Brazil starts with the fermentable wort, in which a yeast is generally added to promote the fermentation process. (1) The most used yeast is the *Saccharomyces cerevisiae* the process needs to be controlled to avoid result variations in the production, for this, yeast quantification and tanks and water decontamination are required, currently, yeast quantification is performed by withdrawing a sample from the fermentation tank and taking it to a laboratory for analysis. Nevertheless, this environment change influence the extrinsic characteristic the fermented wort, creating a significant error increase in the qualitative and quantitative analysis, literature shows that the use of optical technique with multivariable analysis may be an auxiliary tool for the determination of yeast concentration, and the high performance liquid chromatography can be used to validate the tests (2), this project aims for the quantification of yeasts present in alcohol fermentation through optical spectroscopy integrated to analysis multivariable (3), since the bactericide and fungicide potential of ultra-violet light is well-known, this project will verify the viability of using ultra-violet (UV) light for decontamination of the water in barrels and also during the washing processing after fermentation.

Keywords: Yeast. Optical spectroscopy. Ultra-violet.

Referências:

- 1 MAUGERI FILHO, F. Produção de polissacarídeos. In: LIMA, U. A. et al. (Coord.). **Biotecnologia industrial: processos fermentativos e enzimáticos**. São Paulo: Edgard Blucher, 2001. v. 3, cap. 6, p. 125-154.
- 2 COLLINS, C. H.; BRAGA, G. L.; BONATO, P.S. **Fundamentos de cromatografia**. Campinas: UNICAMP, 2006.
- 3 ESTRACANHOLLI, E. S. **Quantificação óptica de carboidratos e etanol em mosto cervejeiro**. 2012. 142 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

PG137

RMN aplicada a meios porosos: simulação computacional para relaxação transversal

OLIVEIRA, E. L.¹; D'EURYDICE, M. N.²; BONAGAMBA, T. J.¹

everton.lucas.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²School of Petroleum Engineering - University of New South Wales

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) possui importantes técnicas para a caracterização de meios porosos em geral, por exemplo, rochas, ossos e cerâmicas, destacando Inversão-Recuperação, Spin-Eco e Gradiente de Campo Magnético Pulsado. Estas técnicas são utilizadas para medir os tempos de relaxação T_1 , T_2 e a difusão translacional do fluido imerso no meio poroso e contêm importantes informações do meio, tais como permeabilidade, porosidade e susceptibilidade magnética(1). Apesar dos métodos de RMN citados acima não apresentarem grandes desafios atualmente quanto à análise e interpretação dos dados de fluidos livres e meios homogêneos, o estudo da dinâmica dos fluidos imersos em meios porosos é hoje um dos grandes desafios de várias áreas do conhecimento, tanto em termos teóricos quanto experimentais. Para superar tais desafios é indispensável o uso de métodos bidimensionais de correlação, tais como $T_2 - T_2$ Exchange[2] e $D - T_2$. Os objetivos deste trabalho foram o desenvolvimento de simulações computacionais e a realização de experimentos de modo a obter através de dados experimentais e simulados, quantidades referentes à morfologia do sistema. Atualmente, na simulação da dinâmica das moléculas do fluido imerso no meio poroso foram considerados apenas seus movimentos aleatórios devido à agitação térmica. Esses movimentos foram representados pelo método de *random walk*, e a relaxação transversal do sistema representada pela defasagem dos spins devida tanto às interações do fluido/fluido quanto à interação fluido/sólido[3]. Uma das principais teorias de relaxação do sinal de RMN proposta por Bloembergen-Purcell-Pound propõe que a defasagem dos spins é devida ao movimento aleatório das moléculas do fluido(1). Desta forma, nas simulações, a posição e orientação das partículas são modeladas de acordo com esses conceitos. Para validar as técnicas experimentais, e também os modelos teóricos e computacionais nosso Grupo tem se dedicado na confecção de meios porosos artificiais, criando cerâmicas com propriedades morfológicas controladas. Sistemas reais, sejam rochas sedimentares ou cerâmicas, são reconstruídos computacionalmente através de imagens obtidas por microtomografia de raios-X 3D e modelos estritamente computacionais também são utilizados, onde quantidades relacionadas à morfologia da rede porosa e conectividade podem ser exploradas. Os dados unidimensionais obtidos na simulação reproduzem as medidas experimentais de distribuição de tempos de relaxação obtidos pela técnica de múltiplos ecos conhecida pelo acrônimo CPMG(1-2), permitindo a obtenção de parâmetros de interação fluido/sólido e da morfologia do meio poroso(1). Dados bidimensionais também são reproduzidos nas simulações e são relativos aos obtidos nos experimentos de $T_2 - T_2$ Exchange(2-3). Esta técnica ganhou destaque nas últimas décadas por ser promissora no estudo da dinâmica do fluido imerso no meio poroso, obtendo tempos relativos à troca entre sítios onde as moléculas do fluido apresentam diferentes tempos de relaxação. Atualmente, os modelos computacionais propostos são explorados em conjunto com equações de troca já conhecidas

na área de RMN(2). Concluindo, a abordagem computacional desenvolvida, unindo conceitos de física estatística e informações obtidas através de microtomografia e RMN, ofereceram importantes dados sobre a dinâmica das moléculas do fluido que saturam o meio poroso, enriquecendo a importância da RMN para o estudo de rochas de reservatório de petróleo.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Simulação por random walk. Relaxação transversal.

Referências:

1 D'EURYDICE, M. N . **Desenvolvimento de metodologias para o estudo de meios porosos por ressonância magnética nuclear** . 2011. 172 p. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

2 DORTCH, R. D.; HORCH, R. A.; DOES, M. D . Development, simulation, and validation of NMR relaxation-based exchange measurements . **Journal of Chemical Physics**, v. 131, n. 16, p. 164502, 2009. doi: 10.1063/1.3245866.

3 MELEAN, Y.; CALLAGHAN, P.; WASHBURN, K.; ARNS, C.H. A numerical analysis of NMR pore-pore exchange measurements using micro X-ray computed tomography. **Diffusion Fundamentals**, v. 10, p. 30.1-30.3, 2009. Disponível em: <http://www.uni-leipzig.de/~diff/pdf/volume10/diff_fund_10%282009%2930.pdf>. Acesso em: 07 ago. 2014.

PG138

Fractais aplicados a análise de imagens microscópicas de organismos vegetais

OLIVEIRA, I. M.¹; BRUNO, O. M.¹

bodelha@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Pretendo apresentar detalhes do projeto a ser desenvolvido, uma vez que os mesmos ainda não foram totalmente definidos, e que não haverá tempo hábil para exibição de resultados. Dentre o que se pretende apresentar, encontra-se justificativas acerca de aplicabilidade cotidiana da técnica, o quanto a mesma já é aplicada no meio acadêmico, bem como variações de técnicas que serviriam aos mesmos objetivos. Outro fator que provavelmente será abordado, é esta técnica funcionar em paralelo com outras para determinação, por exemplo, de relações taxonômicas entre diferentes espécies(1), servindo como uma confirmação para as relações já definidas ou uma opção preliminar pra as outras. Nesse ponto, é fundamental que haja uma certa "análise em massa" de diferentes grupos taxonômicos a fim de qualificar a técnica para este fim de classificação. Um fractal é um objeto geométrico que pode ser dividido em partes, cada uma das quais semelhante ao objeto original. Diz-se que os fractais têm infinitos detalhes, são geralmente autossimilares e independem de escala. A aplicação da geometria de fractais em análise de imagens consiste em descrever o objeto retratado em termos de dimensões fractais, bem como realizar uma série de medidas a partir desta geometria, gerando maior riqueza de detalhes e aumentando a precisão da descrição.

Palavras-chave: Fractal. Imagens. Plantas.

Referências:

1 SÁ JUNIOR, J. J. M. **Identificação de espécies vegetais por meio de análise de imagens microscópicas de folhas**. 2008. 92 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.

PG139

Molecular and cellular characterization of photodynamic therapy

ONO, B. A.¹; KURACHI, C.¹

bruno.ono@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The development of new treatments is necessary in the present days in order to help physicians cure new and old diseases in an efficient and in a better way. In that way, photodynamic therapy (PDT) is an emergent modality in the treatment of diseases and has the advantage of non-invasival protocol.(1) This treatment integrates a compound (photosensitizer), which is activated with certain wavelength of light and transforms molecular oxygen in reactive oxygen species (ROS). These species are very reactive with cellular compounds and can cause cellular death. The localization of photosensitizer (PS) influences the cell death. (2) When a PS is activated, if it is bound on cell membrane, it promotes a high rate of necrosis, because the cell loses the control to degrade the organelles. On the other hand, when it is bound on outer mitochondrial membrane (OMM), it promotes the permeabilization of the membrane and liberates the proteins that initiate apoptosis. The therapy is also controlled with light fluence, photosensitizer concentration and molecular oxygen into the cell. The fluorescence techniques are very common to study the effect of new PS in cells. This technique is widely employed in microscopy of live organism, because it is sensitive and can obtain parameters in molecular scale. Fluorescence Life Time Imaging Microscopy (FLIM) is one type of this technique utilized in this study. It uses the fluorescence life time of fluorophores to obtain information on cell environment as pH, viscosity and ions concentration. (3) This technique is used nowadays to diagnose different disorder cells, like cancer. In Brazil, according to INCA (Instituto Nacional do Cancer), the expected incidence of malignant melanoma to 2014 is 6.000 new cases. That type of cancer is very dangerous because it has high rate of mortality. In this study, we are investigating the localization of Chlorine E6 and Photogem (photosensitizers) in malignant melanoma cells of mouse (B16F10).

Keywords: Photodynamic therapy. FLIM. Melanoma.

Referências:

1 BROWN, S. B.; BROWN, E. A.; WALKER, I. . The present and future role of photodynamic therapy in cancer treatment. **Lancet**: oncology, v. 5, n.8, p.497-508, Aug. 2004.

2 ALLISON, R. R.; MOGHISSI, K. Photodynamic therapy (PDT): PDT mechanisms. **Clinical Endoscopy**, v. 46, n.1, p. 24-29, 2013.

3 BEREZIN, M. Y.; ACHILEFU, S. Fluorescence lifetime measurements and biological imaging. **Chemical Review**, v. 110, n.5, p. 2641-2684, May 2010.

PG140

Estudo da estrutura e parceiros proteicos da proteína codificada pelo gene micro-exon 14 (MEG-14) do parasita *Schistosoma mansoni*

ORCIA, D.¹; LOPES, J. L.¹; MACEDO, J. N. A.¹; DeMARCO, R.¹

debbyorcia@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os genes *micro-exons* (MEGs) foram recentemente identificados no genoma do *Schistosoma mansoni* (1), verme responsável pela esquistossomose, doença que afeta mais de 250 milhões de pessoas em mais de 70 países. (2) Devido à capacidade de produção de proteínas variantes pelos MEGs e a verificação de que várias proteínas codificadas por estes genes são secretadas, acredita-se que estas proteínas possuam um papel importante na interação parasito-hospedeiro. (3) Desta forma, objetivamos estudar e caracterizar a estrutura e dinâmica conformacional da proteína MEG-14, pertencente à família de proteínas codificadas por MEGs, e confirmar sua interação com uma importante proteína pertencente ao sistema imune humano, a proteína S100A9. Análises biocomputacionais com a proteína MEG-14 sugeriram que a porção solúvel da proteína deveria ser prioritariamente desordenada. A partir dessas informações e utilizando técnicas espectroscópicas, como o dicroísmo circular (CD), foi demonstrado que a proteína apresentava estrutura secundária essencialmente desordenada quando em solução aquosa. Entretanto, em diversas condições a mesma se mostrou propensa a enovelar-se. O enovelamento parcial foi observado quando a proteína foi submetida a uma elevação da temperatura (comportamento reversível). Além disso, um ganho de estrutura secundária foi observado quando a proteína se encontrava na presença de vesículas de fosfolipídios e micelas de detergente carregadas negativamente. Esta mudança não foi observada com vesículas e micelas com carga neutra ou zwitteriônica. A absorção da proteína sobre uma superfície, seguido por desidratação induziu o ganho de estrutura helicoidal, sendo um comportamento reversível, pois uma vez re-hidratada a proteína MEG-14 volta a adquirir sua estrutura secundária essencialmente desestruturada. Estes resultados corroboram para a identificação da MEG-14 como uma clássica proteína intrinsecamente desordenada (IDP) e abre a possibilidade de sua interação com diferentes parceiros e fatores a serem relacionadas com os papéis multifuncionais e estados dentro do hospedeiro. Além disso, através da técnica de pulldown foi possível confirmar a interação da proteína MEG-14 com a proteína S100A9, sendo essa interação dependente de cálcio. Análises *in vitro* da interação MEG-14/S100A9 foram realizadas através das técnicas de ITC e SPR, nas quais foi possível obter-se a constante de dissociação entre as proteínas, sendo 1.8nM e 2nM, a partir de ITC e SPR, respectivamente. Medidas de SRCD das duas proteínas juntas e a somatória dos espectros das proteínas separadas mostraram que, quando juntas, as proteínas adquirem um maior conteúdo de estrutura secundária. Entretanto, não é possível estabelecer qual das duas ou se as duas ganham estrutura, uma vez que a proteína S100A9 também apresenta em seu C-terminal uma região desordenada. Por último, experimentos *ex vivo*, utilizando-se a proteína S100A9 marcada com fluoróforo, mostraram que quando ingerida pelo parasita, esta proteína se acumula na glândula do esôfago, local onde já foi localizada os transcritos da proteína MEG-14 em *S. japonicum*, sugerindo que esta interação está ocorrendo também com a proteína MEG-14 nativa.

Palavras-chave: Genes *micro-exons*. *Schistosoma mansoni*. Proteína S100A9.

Referências:

1 BERRIMAN,, M; HAAS,B. J.; EI-SAYED, N. M. . The genome of the blood fluke *Schistosoma mansoni*. **Nature**, v.460, n.7253, p. 352-8, 2009.

2 WORLD HEALTH ORGANIOZATION.WHO. **Schistosomiasis. situation and trends**. 2012. Disponível em:<http://www.who.int/gho/neglected_diseases/schistosomiasis/en>. Acesso em: 10/08/2014.

3 DeMARCO, R. et al. Protein variation in blood-dwelling schistosome worms generated by differential splicing of micro-exon gene transcripts. **Genome Research**,. v. 20, n.8, p.1112-1121, 2010.

PG141

Estudos de dinâmica molecular da proteína TM1030 de *thermotoga marítima*

PALOMINO SALCEDO, D. L.¹; HORJALES REBOREDO, E.¹

palomino@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Além disso, se fazem análises de modos normais e componentes principais das proteína. A *Thermotoga marítima* (Tm) é uma bactéria que vive em temperaturas na faixa dos 65oC e os 90oC. (1) A proteína TM1030 de Tm, é um regulador transcricional da família TetR, (2) um estudo feito na cristalização desta proteína mostrou que em temperaturas por embaixo da ótima para a sobrevivência da bactéria, a proteína mantém sua estrutura, (3) e também que o fator de temperatura B diminui com o aumento da temperatura. Duas trajetórias de dinâmica molecular de 100 ns, usando solvente explícito em caixa (15 AA maior que a proteína) e potencial Charmm36 foram calculadas e estão em processo de análise (estimação de fatores de temperatura B, componentes principais, entre outros). A minimização de energia com gradiente menor que 10⁻⁵ está em processo usando potenciais de solvente implícito, com o qual se vão fazer análises de modos normais.

Palavras-chave: Dinâmica molecular. Fator de temperatura. Modos normais.

Referências:

- 1 HUBER, R. et al. *Thermotoga maritima* sp. nov. represents a new genus of unique extremely thermophilic eubacteria growing up to 90C. **Archives of Microbiology**, v. 144, n. 4, p. 324-333, 1986.
- 2 NELSON, K. et al. Evidence for lateral gene transfer between Archaea and bacteria from genome sequence of *Thermotoga maritima*. **Nature**, v. 399, n. 6734, p. 323-329, 1999.
- 3 KOCLEGA, K. et al. Hot macromolecular crystals. **Crystal Growth & Design**, v. 10, n. 2, p. 580, 2009.

PG142

Maximização do contraste ASL em sequências multi-fase com a introdução de uma modulação no ângulo de flip

PASCHOAL, A. M.¹; PAIVA, F. F.¹

ampaschoal@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Arterial spin labeling (ASL) (1) é um método bem estabelecido para obtenção de mapas quantitativos de perfusão sanguínea cerebral de forma não invasiva. Na maioria das implementações de ASL, um único tempo de inversão (TI) (2) é usado para estimar os valores de fluxo sanguíneo cerebral (CBF). (3) Neste caso, os efeitos provocados pelas diferenças regionais no tempo de trânsito arterial são difíceis de estimar e podem potencialmente introduzir erros no cálculo dos valores de perfusão. Isto é particularmente crítico para os pacientes com doenças relacionadas à perfusão sanguínea cerebral, tais como acidente vascular cerebral e estenose de carótida. Uma abordagem possível para superar este problema relacionado ao tempo de trânsito se baseia na utilização de diferentes TIs entre a marcação e a aquisição das imagens. No entanto, com estas técnicas convencionais multi-fases, o contraste ASL em fases tardias é prejudicado devido à aplicação repetida de pulsos de excitação e à relaxação longitudinal, tornando difícil a avaliação da perfusão tecidual em regiões onde o tempo de trânsito é mais longo. No presente estudo, apresentamos uma otimização do esquema de aquisição, explorando a modulação do ângulo de flip utilizado para aquisição das imagens de modo a manter o contraste ASL constante ao longo das múltiplas fases. Para isso, foi feito um estudo detalhado baseado em simulações das intensidades de sinais, tanto para a condição de marcação quanto para a condição de controle comparando o método convencional (ângulo de flip fixo) com o método proposto (ângulo de flip modulado). Essas simulações também tiveram como objetivo determinar o melhor valor de ângulo de flip máximo, a partir do qual se definem todos os outros para as demais fases. Além disso, o tempo de relaxação longitudinal (T1) não é constante em cada uma das regiões do cérebro, sofrendo pequenas variações ponto a ponto. Para estudar o comportamento do sinal levando em conta esta variação, foram feitas simulações utilizando o método de Monte Carlo, novamente comparando o método convencional com o método proposto. Feito isso, foram realizados testes em voluntários saudáveis utilizando tanto protocolos para a metodologia convencional quanto protocolos com a implementação para ângulo de flip modulado. Os resultados das imagens adquiridas mostraram que para o método convencional tem-se uma intensidade de sinal alta para as primeiras fases adquiridas e uma seguinte queda na intensidade de sinal com o decorrer das fases, resultando em imagens com baixa relação contraste-ruído, o que dificulta a análise dessas imagens de forma diagnóstica. Utilizando o método com modulação do ângulo de flip, o que se viu foi um sinal não tão intenso quanto aquele obtido na primeira fase da metodologia convencional, porém praticamente constante em todas as fases, com melhor relação contraste-ruído que o anterior. Este resultado está de acordo com o obtido nas simulações, mostrando que o método é promissor e deve viabilizar sua utilização em estudos envolvendo pacientes com doenças relacionadas à alteração na hemodinâmica cerebral, tais como as citadas a cima, permitindo, assim, que medidas não invasivas de perfusão sejam feitas nesse grupo de pacientes.

Palavras-chave: ASL. Multi-fase. Perfusão.

Referências:

1 DETRE, J. A. et al. Tissue specific perfusion imaging using arterial spin labeling. **NMR in Biomedicine**, v. 7, n.1-2, p. 75-82, 1994.

2 GOLAY, X.; HENDRIKSE, J.; LIM, T. C. C. Perfusion imaging using arterial spin labeling. **Topics in Magnetic Resonance Imaging**, v. 15, n. 1, p.10-27.

3 LEBIHAN, D. Theoretical principles of perfusion imaging: application to magnetic resonance imaging. **Investigative Radiology**, v. 27, suppl. 2, p. S6-S11, 1992.

PG143

Dinâmica de portadores e confinamento quântico em sistemas eletrônicos multicomponentes formados em nanofios heteroestruturadas e em camadas semicondutoras múltiplas

PATRICIO, M. A. T.¹; PUSEP, Y. A.¹

anton_2080@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os sistemas eletrônicos multicomponentes formados em heteroestruturas semicondutores unidimensionais (nano fios) e quasetridimensionais (poços quânticos múltiplos) serão investigados. Principalmente, o método de estudo de respostas ópticas de poços quânticos individuais de um sistema multicomponente, desenvolvido em trabalhos recentes, será usado. (1-2) Utilizando medidas de espalhamento Raman, de magneto-fotoluminescência e de magneto-transporte planejamos estudar as propriedades estruturais e eletrônicas em vários tipos de fios quânticos compostos de heteroestruturas semicondutoras multicamadas GaAsAlGaAs, GaAs/GaP e InAs/InP crescidas por epitaxia de feixes moleculares. O objetivo desta parte do projeto é desenvolver métodos de fabricação de dispositivos baseados em hetero-estruturas multicamadas formados em nano fios que podem ser utilizados em dispositivos nano-fotônicos principalmente, como células solares e sensores. Ainda mais, o sistema eletrônico unidimensional modulado por potencial de multicamadas apresenta um objeto único, onde os efeitos de interação entre os elétrons podem causar efeitos novos, recentemente previstos teoricamente. (1) Além disso, os efeitos de interação entre os elétrons serão investigados em poços quânticos múltiplos baseados em ligas AlGaAs e InGaAsP.

Palavras-chave: Heteroestruturas semicondutores . Epitaxia de feixes moleculares. Poços quânticos.

Referências:

1 PUSEP, Y. A.; FERNANDES DOS SANTOS, L.; GUSEV, G. M.; SMIRNOV, D.; BAKAROV, A. K. Circularly polarized photoluminescence as a probe of density of states in GaAs/AlGaAs quantum hall bilayers. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 4, p. 046802, 2012.

2 GREYTAK, A. B.; BARRELET, C. J.; LI, Y.; LIEBER, C. M. Semiconductor nanowire laser and nanowire waveguide electro-optic modulators . **Applied Physics Letters**, v. 87, n. 15, p. 151103-1, 2005.

PG144

Caracterização estrutural e funcional de novos ligantes do receptor PPAR gama

PAULA, K. de¹; NASCIMENTO, A. S.¹

karina_depaula@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os receptores nucleares (RN) são uma família de fatores de transcrição gênica, sensíveis a ligantes e estão envolvidos em vários processos metabólicos do organismo. (1) Os receptores ativados por proliferados peroxissomais (PPARs) são RNs com papel importante no metabolismo de glicose, na adipogênese e migração de macrófagos, dentre outros fatores. Estes efeitos são mediados pela ação de moléculas endógenas e por duas classes de fármacos: as tiazolidinadionas (TZDs) e os fibratos. (2) O PPAR gama é o alvo molecular dos TZDs, empregados no tratamento do diabetes melito do tipo II. Com os achados recentes relatando efeitos colaterais severos associados ao uso dos fármacos desta classe, é crescente a demanda por moléculas alternativas que possam ser empregadas como agentes sensibilizadores da insulina. (3) Desta forma, este trabalho visa propor novas moléculas que atuem como ligantes do receptor PPAR gama, além de estabelecer as bases moleculares e estruturais da interação ligante-receptor neste sistema biológico. As metodologias propostas foram: expressão e purificação, ensaios de cristalização, coleta e processamento de dados de difração de Raios-X e ensaios de ligação utilizando a técnica de espectroscopia de fluorescência. Até o momento foram obtidos cristais na forma APO através de diferentes condições de cristalização e protocolos de fluorescência estão sendo estabelecidos visando quantificar a interação com ligantes através do quenching do sinal de fluorescência das tirosinas na região do sítio ativo em função da adição de concentrações crescentes do ligante.

Palavras-chave: Caracterização estrutural. Lligantes. PPAR gama.

Referências:

1 RIBEIRO, R.C.; KUSHNER, P.J.; BAXTER, J.D. The nuclear hormone receptor gene superfamily. **Annual Review of Medicine**, v. 46, p. 443-453, 1995.doi: 10.1146/annurev.med.46.1.443.

2 HARMON, G.S.; LAM, M.T.; GLASS, C.K. PPARs and lipid ligands in inflammation and metabolism. **Chemical Review**, v.111, n.10, p. 6321-6340, 2011.

3 NASCIMENTO, A.S. et al. . Structural rearrangements in the thyroid hormone receptor hinge domain and their putative role in the receptor function. **Journal of Molecular Biology**, v.360, n.3, p.586-598, 2006.

PG145

Planejamento de inibidores da enzima cruzaina candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas

PAULI, I.¹; FERREIRA, R. S.²; DESSOY, M. A.³; SAMPAIO, T. S.³; SLAFER, B.³; SOUZA, M. L.¹; ANDRICOPULO, R. K.¹; SALES, A. I. L.¹; OLIVA, G.¹; DIAS, L. C.³; ANDRICOPULO, A. D.¹

ivanipauli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Bioquímica e Imunologia - UFMG

³Laboratório de Química Orgânica Sintética - UNICAMP

A cruzaina (EC 3.4.22.51) é a principal cisteína protease do *Trypanosoma cruzi*, agente etiológico da doença de Chagas. O papel da enzima na nutrição, evasão do sistema imune do hospedeiro e invasão celular é bem conhecido. Devido à sua relevância biológica, ela é considerada um dos alvos mais importantes para o desenvolvimento de novos fármacos para a doença de Chagas. (1) Mesmo após mais de cem anos de sua descoberta, realizada em 1909 pelo cientista brasileiro Carlos Chagas, o tratamento para esta doença ainda é um grande desafio. A terapia disponível é antiga, limitada e insatisfatória, exaltando a urgência da identificação de novas alternativas para o seu combate. Ainda hoje, a doença de Chagas é um problema de saúde grave na América Latina e uma doença emergente em países não endêmicos, sendo considerada pela Organização Mundial da Saúde (OMS) uma doença tropical negligenciada de alta prioridade em seus programas de pesquisa e desenvolvimento. (2) Além de sua relevância clínica e epidemiológica, ela também se torna importante no setor econômico. A mortalidade precoce e a incapacidade significativa causadas por esta doença, que muitas vezes afeta a população de adultos jovens, resultam em um grande impacto econômico e social, incluindo desemprego e diminuição da capacidade produtiva. Neste contexto, o objetivo do trabalho é desenvolver novos inibidores da cruzaina, aplicando de forma combinada e integrada, estratégias experimentais e computacionais em química medicinal e planejamento de fármacos (estudos estruturais, síntese dos compostos, expressão e purificação da enzima, ensaios cinéticos e celulares, simulações de docagem e dinâmica molecular, QSAR). Como ponto de partida para a otimização molecular e o planejamento racional baseado na estrutura, utilizamos como compostos líderes dois potentes inibidores da cruzaina, previamente descritos na literatura (3), de natureza não-peptídica e inibição do tipo não-covalente e competitiva. A fim de aprofundar o entendimento das relações entre a estrutura e atividade (SAR, sigla inglesa para structure-activity relationships), séries de análogos foram sintetizadas e avaliadas contra a cruzaina. Os compostos mais potentes foram avaliados *in vitro* contra o *T. cruzi*. Um conjunto promissor de compostos foi selecionado com valores de IC₅₀ contra a enzima na faixa de nano- e micromolar e, em alguns casos, com atividade contra o *T. cruzi* em concentrações micromolares. Entre os derivados do primeiro composto líder, merece destaque o composto 18, um inibidor competitivo, com alta potência e afinidade pela enzima alvo (valores de IC₅₀ = 200 nM e K_i = 82 nM). O processo de otimização do segundo composto líder levou à descoberta do composto 71 (IC₅₀ = 1,4 μM e K_i = 0,19 μM). Compostos com atividade de inibição da cruzaina significativamente superior aos compostos líderes foram encontrados

em ambos os casos, validando as metodologias empregadas. A investigação da atividade tripanocida in vitro e ensaios preliminares de citotoxicidade revelaram que os compostos com maior atividade inibitória apresentam um perfil interessante para a descoberta de novas entidades químicas (NCEs, sigla inglesa para new chemical entities) e para o desenvolvimento de novos candidatos a fármacos contra a doença de Chagas.

Palavras-chave: Cruzaína. Doença de Chagas. Planejamento de fármacos.

Referências:

- 1 CAZZULO, J. J.; STOKA, V.; TURK, V. The major cysteine proteinase of *Trypanosoma cruzi*: a valid target for chemotherapy of Chagas disease. **Current Pharmaceutical Design**, v. 7, n. 12, p. 1143-1156, 2001.
- 2 COURA, J. R.; VIÑAS, P. A. Chagas disease: a new worldwide challenge. **Nature**, v. 465, n. 7301, p. S6-S7, 2010.
- 3 FERREIRA, R. S. et al. Complementarity between a docking and a high-throughput screen in discovering new cruzain inhibitors. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 53, n. 13, p. 4891-4905, 2010.

PG146

Production of a Bose-Einstein condensate of two atomic species (Na/K)

PEÑAFIEL, E. P.¹; VIVANCO, F. J.¹; CASTILHO, P.¹; KRUGER, A.¹; ROATI, G.²; FARIAS, K. M.¹; BAGNATO, V. S.¹

edwin@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto Nazionale di Ottica - INO

In this project we are interested in producing a mixture of Na/K Bose-Einstein Condensate. With this system it will be possible to study several effects related to the quantum turbulence phenomenon, namely, vortices formation, modulation of the scattering length and collective excitations. The experimental system being developed is a composition of two independent systems for producing the two species, which will be trapped finally in a principal chamber that will hold the two condensates together. To produce magneto-optical traps of Na and K, we use as source of atoms a 2D MOT. (1) Currently, we are able to produce the MOT of Na atoms, and certainly the K MOT will be ready in several weeks, which will allows us to do the next step, transfer the atoms to a dipole trap and start the characterization of the system. Once the system be finished, the first goal is to measure several Feshbach resonances between Na and K atoms. This is very important for controlling the interaction between the condensates.

Palavras-chave: Bose-Einstein condensate. Quantum turbulence. Feshbach resonances.

Referências:

1 LAMPORESI, G. et al. Compact high-flux source of cold sodium atoms. **Review of Scientific Instruments**, v. 84, n. 6, p. 063102-1-063102-7, June 2013.

PG147

Estudo sobre ligação enzimática improdutivo de enzimas em celulose e biomassa

PELLEGRINI, V. O. A.¹; POLIKARPOV, I.¹; WESTH, P.²

varnoldi@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade de Roskilde

O panorama energético atual reflete a necessidade iminente de investigar formas de energia alternativas, pois o consumo de combustíveis fósseis tem aumentado exponencialmente, assim como, os gases resultantes da sua combustão, fatores que têm motivado o investimento e pesquisa pelos biocombustíveis. Nesse contexto, temos como prática no Brasil, a produção e o uso de bioetanol como combustível desde 1931, com notável evolução durante as últimas décadas, alcançando maturidade e consistência. Contudo, a quantidade de álcool necessária para suprir a demanda, cada vez maior, cria a necessidade de pesquisas por novas formas de obtenção e aprimoramento dos biocombustíveis. (1) Os complexos enzimáticos desenvolvidos até o momento ainda apresentam uma alta relação custo/benefício. Assim, é preciso aumentar a eficiência enzimática, otimizando condições de hidrólise e melhorando a atividade de microrganismos capazes de degradar a celulose e hemicelulose a açúcares fermentescíveis. Desta maneira, a busca por aprendizado e a compreensão de novas técnicas são de extrema importância, para que brasileiros qualificados possam assumir e colaborar com grupos em centros de pesquisa e desenvolvimentos de novas tecnologias. Por isso, nossa pretensão é elucidar o mecanismo de adsorção da enzima na biomassa a fim de compreender a adsorção improdutivo de enzimas celulolíticas e seu efeito sobre o decaimento do processo da hidrólise enzimática. A forma reversível da enzima ligada, a qual hidrolisa ativamente o substrato é lentamente convertida para uma forma mais fortemente ligada, ou também chamada de ligação irreversível que possui pouca ou nenhuma atividade. (2) É importante sabermos quantificar os valores e as atividades de tais formas (reversível e irreversível) de enzima em função do tempo e, assim, esclarecer o modo como a ligação não produtiva de celulasas contribui para a perda de atividade enzimática.

Palavras-chave: Biomassa . Celulasas . Adsorção.

Referências:

1 DE CASTRO, A. M.; DE ALBUQUERQUE DE CARVALHO, M. L.; LEITE, S. G.; PEREIRA JUNIOR, N. Cellulases from *Penicillium funiculosum*: production, properties and application to cellulose hydrolysis. **Journal of Industrial Microbiology & Biotechnology**, v. 37, n. 2, p. 151-158, 2010.

2 MA, A.; HU, Q.; QU, Y.; BAI, Z.; LIU, W.; ZHUANG, G. The enzymatic hydrolysis rate of cellulose decreases with irreversible adsorption of cellobiohydrolase I. **Enzyme and Microbial Technology**, v. 42, n. 7, p. 543-547, 2008.

PG148

Cluster explosive synchronization in complex networks

JI, P.¹; PERON, T. K. D. M.²; MENCK, P. J.¹; RODRIGUES, F. A.³; KURTHS, J.¹

thomaskaue@gmail.com

¹Department of Physics - Humboldt University

²Instituto de Física de São Carlos - USP

³Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Synchronization processes are observed in many physical, biological, chemical, technological and social systems. These systems can be described and modeled through the theory of complex networks, in a way that the full comprehension of the emergence of collective behavior in these complex systems will only be achieved by theories that encompass the interaction of its elements. Recently, correlations between intrinsic dynamics and local topology have become a new trend in the study of synchronization in complex networks. This paradigm has been shown to lead to the emergence of explosive synchronization transitions in networks of first-order Kuramoto oscillators. In this work, we demonstrate that the nodes in a second-order Kuramoto model perform a cascade of transitions toward a synchronous macroscopic state, which is a novel phenomenon that we call cluster explosive synchronization. (1) We provide a rigorous analytical treatment using a mean-field analysis in uncorrelated networks. Our findings are in good agreement with numerical simulations and fundamentally deepen the understanding of microscopic mechanisms toward synchronization. (1)

Keywords: Synchronization. Complex networks. Nonlinear dynamics.

Referências:

1 JI, P.; PERON, T. K. D. M.; MENCK, P. J.; RODRIGUES, F. A.; KURTHS, J. Cluster explosive synchronization in complex networks. **Physical Review Letters**, v. 110, n. 21, p. 218701-1-218701-5, 2013.

PG149

Quantum speed limit e geometria da informação

PIRES, D. P.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹

diegopaiva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A mecânica quântica é restritiva quanto a aquisição e processamento da informação de um dado sistema físico através da imposição de incertezas na precisão de medidas e observáveis. A mecânica quântica também estabelece limites fundamentais na velocidade máxima de evolução entre dois estados quânticos. Vários trabalhos reportados nesta direção mostraram possíveis conexões entre estes limites e a computação quântica ou ainda com a termodinâmica. Neste contexto, estamos interessados em responder a questão: qual o tempo mínimo de evolução ou *speed limit* entre dois estados quânticos arbitrários? Em sistemas fechados este tempo mínimo de evolução (entre estados ortogonais ou generalizações para estados não-ortogonais) é dado em termos da variância do hamiltoniano que rege a dinâmica do sistema ou de sua energia média. (1-2) Por outro lado, o *speed limit* foi calculado recentemente considerando a dinâmica de sistemas quânticos abertos através de uma abordagem geométrica baseada na fidelidade de Bures. (3) Neste estágio do projeto apresentamos um novo tratamento geométrico para derivar o *quantum speed limit* para sistemas fechados. Nossa descrição é baseada na geometrização do espaço de estados quânticos introduzindo uma métrica de informação que define a distância estatística entre estados mistos. A partir deste resultado, mostramos que o *speed limit* é inversamente proporcional a soma de duas contribuições com origens fisicamente distintas: a primeira, relativa às populações, depende da informação de Fisher ao invés da variância do hamiltoniano; a segunda parcela está vinculada às coerências através da dependência dos autoestados do operador densidade no conjunto de variáveis que define o espaço de parâmetros adotado. Assim, o tempo de evolução entre os estados inicial e final deve ser maior no caso em que as coerências não estão presentes. Esperamos estender estes resultados para a dinâmica de sistemas abertos mediante o formalismo de operadores de Kraus analisando os regimes *phase damping* e *amplitude damping*. Além disso, em virtude do caráter geral da métrica de informação que dispomos, verificaremos sua relação com o *thermodynamic length* e o trabalho dissipado envolvendo protocolos quânticos a temperatura finita segundo a escolha de um espaço de parâmetros termodinâmicos adequado.

Palavras-chave: *Quantum speed limit*. Geometria de estados quânticos. Teoria da informação quântica.

Referências:

1 MANDELSTAM, L; TAMM, I. The uncertainty relation between energy and time in non-relativistic quantum mechanics. **Journal of Physics**, v. 9, n. 4, p. 249-254, 1945.

2 MARGOLUS, N.; LEVINTIN, L. B. The maximum speed of dynamical evolution. **Physica D: nonlinear phenomena**, v. 120, n. 1-2, p. 188-195, 1998.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

3 TADDEI, M. M. et al. Quantum speed limit for physical processes. **Physical Review Letters**, v. 110, n. 5, p. 050402-1-050402-5, 2013.

PG150

Estratégias para detecção e tratamento do melanoma

PIRES, L.¹; NOGUEIRA, M. S.¹; GRECCO, C.¹; PRATAVIEIRA, S.¹; MORIYAMA, L. T.¹; KURACHI, C.¹

laylabtu@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O melanoma é a neoplasia maligna de pele mais agressiva, e embora represente cerca de 5% dos tumores cutâneos diagnosticados no Brasil, é responsável por cerca de 80 a 85% dos óbitos por tumores cutâneos. A principal abordagem terapêutica é a cirurgia, com a ressecção da lesão cutânea e, em alguns casos, com o esvaziamento linfonodal. (1) A terapia fotodinâmica (TFD) é uma modalidade terapêutica já utilizada em diversos tumores como de colo uterino, de esôfago, gástrico, de bexiga e pele não melanoma. A técnica é baseada na interação de luz em comprimento de onda específico e fotossensibilizador, na presença do oxigênio molecular, visando morte celular. (2) Por ser um câncer pigmentado, o melanoma normalmente não responde bem à terapia fotodinâmica, devido à absorção da luz na superfície do tumor, inviabilizando sua erradicação volumétrica. Este projeto pretende desenvolver novas estratégias para a detecção e tratamento do melanoma. Neste estudo, a detecção do melanoma e determinação de sua margem foi realizada por meio do tempo de vida de fluorescência com excitação em 378 e 445nm atuando principalmente nas moléculas de NADH e FAD, respectivamente. Como NADH e FAD são importantes co-enzimas envolvidas no metabolismo celular, alterações no tempo de vida de fluorescência dessas moléculas estão relacionadas às alterações metabólicas do tecido. Dessa forma, pode ser uma importante ferramenta para a detecção de tumores, como o melanoma. Os resultados em modelo experimental de melanoma em camundongos nude apresentaram sensibilidade de 99,4%, especificidade de 97,4% e acurácia de 98,4% na diferenciação entre tecido normal e melanoma. Nos ensaios para determinar um protocolo de tratamento do melanoma utilizando terapia fotodinâmica, foram avaliados clareadores ópticos. Esses clareadores são substâncias hiperosmóticas que diminuem o espalhamento da luz no tecido seja por homogeneidade do índice de refração ou por realinhamento das fibras de colágeno. Dessa forma, a penetração da luz no tecido é favorecida. Foram utilizadas soluções compostas de glicerol, triton x-100 e ureia em diversas concentrações e a alteração da característica óptica do tecido foi determinada por medidas de refletância em função da distância na superfície da lesão. A partir dos decaimentos, obtiveram-se então os coeficientes de atenuação total do melanoma. O uso dos clareadores reduziu o coeficiente de atenuação total do tecido entre 50 e 86%. Os melhores resultados foram obtidos com a aplicação tópica do glicerol 70%. Após o clareamento, a TFD foi então realizada. Para isso, foram utilizados 20 animais, 10 para o grupo TFD e 10 para TFD associada ao clareador. A análise histopatológica do grupo TFD revelou importante dano tecidual causado pela TFD na superfície, entretanto ainda foi possível observar células de melanoma nas camadas mais profundas da lesão. Por outro lado, o grupo associação TFD e clareador apresentou dano mais severo e não foi detectado células de melanoma após o tratamento. A detecção por tempo de vida de fluorescência assim como a associação de TFD e clareadores ópticos mostraram-se importantes ferramentas para diagnóstico e tratamento do melanoma. Agradecimentos: FAPESP, Capes, CNPq e Centro de Bioterismo-USP.

Palavras-chave: Melanoma. Terapia fotodinâmica. Tempo de vida de fluorescência.

Referências:

1 LEITER, U. et al. Hazard rates for recurrent and secondary cutaneous melanoma: an analysis of 33,384 patients in the German Central Malignant Melanoma Registry. **Journal of the American Academy of Dermatology**, v. 66, n. 1, p. 37-45, 2012.

2 OCHSNER, M. Photophysical and photobiological processes in the photodynamic therapy of tumours. **Journal of Photochemistry and Photobiology**, v. 39, n.1, p. 1-18, 1997.

PG151

Desenvolvimento de técnicas de aquisição e transmissão paralela para aplicações em imagens por ressonância magnética

PIZETTA, D. C.¹; TANNÚS, A.¹

daniel.pizetta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na técnica de obtenção de Imagens por Ressonância Magnética (IRM) quando se deseja preservar sua principal qualidade que é a alta resolução espacial, o tempo de aquisição ainda se apresenta como um gargalo. Métodos de aquisição e transmissão paralela exploram adequadamente conceitos que contribuem para a redução da *Specific Absorption Ratio (SAR)* no paciente ou para a análise de fenômenos onde os tempos de ocorrência são muito curtos, por exemplo, ao nível de moléculas, onde tempos de relaxação muito curtos impedem o devido estudo do fenômeno. Serão estudados e desenvolvidos novos métodos de transmissão, aquisição e reconstrução de imagens baseados em combinações das abordagens de codificação espacial de fase parcial, uso do perfil de sensibilidade e técnicas com múltiplos transmissores como *Transmit SENSE*, os quais já foram conceitualmente comprovados e aplicados e que garantem uma redução significativa do tempo total de aquisição. (1-2) Tais tecnologias trazem novas perspectivas do que podem ser analisadas com estes sistemas, novas possibilidades de aplicações para sistemas rápidos (imagens funcionais), estudos sobre moléculas (que possuem tempos de relaxação muito curtos) além da redução de SAR sobre o paciente nos casos de exames de IRM. É nossa expectativa que estes estudos possam se beneficiar de duas das principais características do Espectrômetro Digital desenvolvido no CIERMag, do qual serão parte integrante, que são parametrização e escalabilidade, necessárias para simplificar a definição de múltiplos receptores e múltiplos transmissores utilizados aqui.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Transmissão paralela. Recepção paralela.

Referências:

- 1 PRUESSMANN, K. P. et al. SENSE: sensitivity encoding for fast MRI. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 42, n. 5, p. 952-962, 1999.
- 2 ADRIANY, G. et al. Transmit and receive transmission line arrays for 7 Tesla parallel imaging. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 53, n. 2, p. 434-445, 2005.

PG152

Implementação de técnicas de imagens por ressonância magnética para o estudo de meios porosos

POLI, R. S.¹; KREBS, M.²; SOUZA, A.²; VIDOTO, E. L. G.¹; PAIVA, F.¹; TANNUS, A.¹; BONAGAMBA, T. J.¹

roberson@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Schlumberger Brazil Research and Geoengineering Center - Rio de Janeiro

A larga aplicação de técnicas de Imagens por Ressonância Magnética (IRM), principalmente em medicina, com a obtenção de imagens com resoluções cada vez maiores, despertou o interesse da petrofísica. (1) Contudo, o alto contraste de susceptibilidade magnética entre a matriz e o fluido, aliado à presença de impurezas paramagnéticas, a princípio impediram a obtenção de imagens de alta resolução e a relação direta do sinal medido com a quantidade de fluido. No entanto, o surgimento de técnicas específicas, avanços no design experimental (principalmente na instrumentação), melhor compreensão das aplicações dos métodos e o interesse em diferentes propriedades dos fluidos e das rochas levaram à renovação do uso de IRM em petrofísica, com aplicações como: mapeamento de fluxo e estrutura; mapeamento de saturação e porosidade e medidas de curvas de pressão capilar. Neste contexto se insere o presente trabalho, cujo objetivo é o desenvolvimento de um sistema de imagens uni e tridimensionais e implementação de técnicas de IRM específicas para o estudo de meios porosos, em especial técnicas do tipo SPRITE (do inglês *Single Point Ramped Imaging with T1 enhancement*) (2), bem como técnicas para o estudo de fluxo, como perfis uni e bidimensionais. Dentre as aplicações, destaca-se o estudo de fluxo em amostras artificiais com porosidade controlada, obtidas por meio de impressão 3D de um sistema projetado, ou em cerâmicas com poros induzidos, ambos os sistemas produzidos no grupo, em que os dados de fluxo obtidos serão correlacionados com simulações numéricas. O fluxo será gerado através de um sistema com roldanas que gerará uma diferença de pressão. Em sua fase inicial, através do uso do sistema de imagens do grupo CIERMag (Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética), foi realizado um estudo de visualização em rochas em parceria com a empresa Schumberger, no qual foram estudadas amostras após tratamento ácido da matriz, processo conhecido como acidificação, que produz caminhos nas rochas denominados wormholes. Foram obtidas imagens com informações, no que concerne aos wormholes, comparáveis as obtidas com a técnica de uCT. Tal trabalho foi pioneiro no sentido de ter sido o primeiro a visualizar wormholes através do uso de IRM. (3)

Palavras-chave: Imagens por ressonância magnética. Meios porosos. Instrumentação.

Referências:

1 MITCHELL, J. et al. Magnetic resonance imaging in laboratory petrophysical core analysis. **Physics Reports**, v. 526, n. 3, p. 165-225, 2013.

2 BALCOM, B. J. et al. Single-point ramped imaging with T1 enhancement (SPRITE). **Journal of Magnetic Resonance A**, v. 123, n. 1, p. 31-134, 1996.

3 KREBS, M. et al. The first visualization of acid treatments on carbonates with 3D nuclear magnetic resonance imaging (NMRI). In: SPE INTERNATIONAL SYMPOSIUM AND EXHIBITION ON FORMATION DAMAGE CONTROL, 2014, Louisiana. **Proceedings...** Richardson: Society of Petroleum Engineers, 2014. doi: 10.2118/168198-MS.

PG153

High energy hadronic interactions and composition of cosmic rays

PRADO, R. R.¹; CONCEIÇÃO, R.²; PIMENTA, M.²; SOUZA, V.¹

raul.prado@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas - Lisboa

Over the last decades, high energy cosmic rays experiments have been important sources of knowledge about our universe and about the fundamental interactions between elementary particles. The Pierre Auger Observatory (1-2) is the largest cosmic rays detector in activity and it was designed to measure astroparticles with energies well above the ones that current accelerators are able to reach. Because of their interaction with earth's atmosphere, the cosmic rays observation have to be made indirectly, through the detection of cascades of secondary particles that we call air showers. Hence, to infer primary particles composition, as well as hadronic interactions properties, from measured air shower features becomes one of the central problems in this area. At the moment, from the air showers observables measured by Auger (X_{max} , for example) (3), it is not possible to conclude whether we are observing a composition transition from light to heavy nucleus or a change in the hadronic interactions properties in high energy. While the former case would imply very dramatic constrains in high energy astrophysical models, the latter could be a signature of new hadronic physics phenomena in the ultra high energy regime. In this context, a plan for upgrading the detectors has been recently discussed by the Auger collaboration in order to break this degeneracy between the nuclear composition and the *new physics* scenario. Although the decision of implementing a muon detector has already been taken, the instrumentation that will be installed is still an open question. This project aims to show the potentialities of statistical analysis using air shower observables which will be measured by the Auger upgrades for distinguishing between the two physical scenarios. The method proposed here is based on the energy evolution analysis of the statistical parameters (average and variance) related to each observable distributions. The observables used are X_{max} , X_{max}^μ , N_μ and β_μ . Due to the limited simulations available, we used the ratio of these parameters in two energy bins in order to quantify their energy evolution. This approach is motivated by the necessity of surpassing the systematic effects from energy scale and hadronic interaction models that would vanish when one look to the parameter energy evolution instead of their value at fixed energy values. The result of the analysis shows that the measurement of the average values of all observables are not enough to distinguish between nuclear composition and *new physics* scenarios. However, it also shows that the variance of X_{max}^μ and N_μ can be reliably used to reach this aim.

Keywords: High energy cosmic rays. Composition. Hadronic interaction.

Referências:

1 ABRAHAM J. et al. Properties and performance of the prototype instrument for the Pierre Auger

Observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A:** accelerators, spectrometers, detectors and associated equipment, v.523, n. 1, p. 50-95, 2004.

2 ABRAHAM J. et al. Correlation of the highest-energy cosmic rays with nearby extragalactic objects. **Science**, v. 318, p. 938-943, 2007. doi:10.1126/science.1151124 .

3 ABRAHAM J. et al. Measurement of the depth of maximum of extensive air showers above 10^{18} eV. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 9, p. 091101, 2010.

PG154

Processamento digital de sinais aplicado a análise de distribuição de tempos de relaxação em ressonância magnética nuclear

QUEIROZ, G. E. T.¹; GUIDO, R. C.¹

getqueiroz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Processamento digital de sinais (DSP - *Digital Signal Processing*) consiste na manipulação matemática, por meio de algoritmos escritos para processadores digitais, visando analisar, extrair ou manipular a informação contida nos sinais digitalizados. O interesse na utilização de técnicas de DSP tem aumentado muito, em parte devido a popularização da computação digital e a rápida evolução do poder computacional e devido as inúmeras aplicações bem sucedidas em diversas áreas do conhecimento científico, como engenharia, economia, física, química e etc. Frente aos resultados positivos a investigação de novas abordagens envolvendo processamento digital de sinais na solução de determinados problemas da física e física computacional é bastante justificável, principalmente nos casos em que os métodos empregados atualmente apresentam custo computacional elevado ou mesmo resultados pouco satisfatórias. Como exemplo podemos citar, de modo geral, a solução de problemas inversos mal-postos bem representado pelo problema específico de determinar a distribuição de tempos de relaxação longitudinal T_1 e transversal T_2 em sinais de magnetização obtidos em experimentos de ressonância magnética nuclear (RMN) envolvendo meios porosos. Estes sinais de magnetização são constituídos de múltiplas componentes de decaimento exponencial e descritos, em uma forma geral, por meio da equação $m(y) = \int g(x)k(y, x)dx$, conhecida como equação integral de Fredholm do primeiro tipo. Nos problemas envolvendo equações de Fredholm, normalmente $m(y)$ e $k(y, x)$ são conhecidas a priori e $g(x)$ é a solução procurada. A forma discreta de $m(y)$ para um sinal de decaimento em uma determinada distribuição de valores T_2 pode ser descrita por $m(\tau) = \sum_{i=1}^n g(T_{2i})e^{(\tau/T_{2i})}$, desta forma, para obter a distribuição dos tempos de relaxação $g(T_2)$ através de $m(\tau)$ é necessário realizar a inversão desta equação. Este procedimento pertence a uma classe de problemas que aparece com bastante frequência na física (1), conhecida como problemas inversos mal-postos. Neste trabalho, objetivou-se solucionar a equação integral de Fredholm do problema descrito, isto é, obter as distribuições de tempos de relaxação através de diferentes abordagens envolvendo técnicas de processamento digital de sinais como filtragem adaptativa e aprendizado de máquina.

Palavras-chave: Processamento digital de sinais. Ressonância magnética nuclear. Problemas inversos.

Referências:

1 HANSEN, P. C. **Rank-deficient and discrete Ill-posed problems:** numerical aspects of linear inversion. Philadelphia: SIAM, 1998. 243 p. (Mathematical Modeling and Computation).

PG155

Estudos estruturais e funcionais de uma endoglucanase pertencente a família das glicosil-hidrolases 45

RAMIA, M. P.¹; GODOY, A.¹; CAMILO, C.¹; KADOWAKI, M.¹; POLIKARPOV, I.¹

marinapramia@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Celulases tem despertado um intenso interesse de pesquisa devido a sua capacidade de converter biomassa celulósica em açúcares solúveis e também por possuir importantes aplicações industriais como na indústria têxtil, alimentícia e para tecnologias de produção de etanol de segunda geração. (1) Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalográfica da proteína recombinante endoglucanase de *Phanerochaete chrysosporium* (PcCel45A), um membro das glicosil hidrolases família 45 e seu complexo com celobiose a 1.4 Å e 1.7 Å, respectivamente. PcCel45A é uma enzima de domínio único, com um estrutura em beta-barril e seu empacotamento geral lembra uma esfera achatada. Possui uma considerável estabilidade térmica e seu sítio ativo forma um longo sulco na superfície da proteína. Para nossa surpresa essa enzima demonstrou que seu centro catalítico é diferente das outras enzimas publicadas dessa família e um dos principais resíduos não é conservado. Além do mais, a estrutura cristalográfica dessa enzima apresenta mais similaridades com as beta-expansinas do que com as outras representantes da família 45. Baseado na estrutura de PcCel45A e seu complexo com a celobiose nós identificamos a nova base catalítica da enzima e analisamos as implicações funcionais dessas diferenças.

Palavras-chave: Glicosil hidrolase. Endoglucanase. Família 45.

Referências:

1 LYND, L. R. et al. Microbial cellulose utilization: fundamentals and biotechnology. **Microbiology Molecular Biology Reviews**, v. 66, n. 3, p. 506-577, 2002 .

PG156

Avaliação do uso da técnica de espectroscopia de emissão óptica com plasma induzido por laser (LIBS) como ferramenta para detecção de doenças na cultura de soja

RANULFI, A. C.¹; MAGALHÃES, A. B.²; MILORI, D. M. B. P.²

aniranulfi@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP / Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

²Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

Com clima diversificado e terras férteis, o Brasil tem vocação natural para o desenvolvimento agropecuário e todas as suas vertentes. Assim, o agronegócio é hoje a principal locomotiva da economia brasileira, representando cerca de um terço do nosso Produto Interno Bruto (PIB). O produto de maior destaque na balança comercial do agronegócio é a soja, contribuindo com cerca de 40% das exportações deste setor. (1) Com este destaque no cenário internacional, aumentam as responsabilidades ambientais e sociais, bem como o esforço de cientistas e produtores para a incorporação de novas tecnologias e inovação no campo na busca pela manutenção do bom desempenho do país no mercado de grãos. Porém, um dos fatores que podem comprometer a expansão desta cultura e conseqüentemente a economia é que as lavouras de soja podem ser ameaçadas por uma variedade de doenças e pragas. Assim, o monitoramento destas é fundamental para que se evitem prejuízos cada vez maiores. Neste sentido, o presente trabalho viabiliza esforços na avaliação da Espectroscopia de Emissão Óptica com Plasma Induzido por Laser (LIBS), como forma de diagnóstico precoce de doenças, se apresentando como uma forma alternativa às inspeções visuais, e ainda como ferramenta para melhor compreensão das variações nutricionais que acometem a planta. Para isso, as análises serão realizadas em folhas de plantas doentes da cultura de soja em dois estágios diferentes: assintomático e sintomático. LIBS é uma técnica espectroanalítica que permite análise multielementar através de microamostragem por ablação a laser, seguida de excitação das espécies presentes no plasma. (2) Dentre as diversas vantagens desta técnica para aplicações na agricultura podemos citar o fato de ser robusta e pouco complexa no que diz respeito à instrumentação, permitindo portabilidade para análises em campo, a medida é feita de forma rápida, sem necessidade de grande preparo de amostra, é economicamente viável e sustentável, já que não produz resíduos químicos, dentre outras. As potencialidades da técnica foram demonstradas pelo Laboratório de Óptica e Fotônica da Embrapa Instrumentação na busca pelo diagnóstico de duas doenças do citros, o HLB e o Cancro cítrico. Para este estudo foram analisadas folhas de citros provenientes de plantas saudáveis, com HLB ou com cancro, e a partir dos dados gerados pela espectroscopia, foram induzidos classificadores a partir de Regressão por Mínimos Quadrados Parciais. Taxas de acerto de 80% e 90% foram alcançadas pelo modelo gerado para o diagnóstico do HLB e do Cancro cítrico, respectivamente, na validação cruzada dos dados. Para o caso do HLB foi observada ainda a variação específica do elemento cálcio nas folhas das plantas doentes em relação às saudáveis. (3) Até o momento foram avaliadas algumas amostras de soja, e através da identificação de alguns picos de emissão foi constatada a presença de carbono, zinco e cálcio nas mesmas. Depois de finalizada esta primeira etapa, será iniciado o estudo de viabilidade da técnica para o diagnóstico de doenças, como Soja louca II e Ferrugem asiática.

Palavras-chave: Soja. Diagnóstico. Espectroscopia com plasma induzido por laser.

Referências:

- 1 COMPANHIA NACIONAL DE ABASTECIMENTO. Safra 2013/14. **Acompanhamento da safra brasileira de grãos**, v. 1, n. 3, p. 1-72, dez. 2013.
- 2 CREMERS, D. A.; RADZIEMSKI, L. J. **Handbook of laser-induced breakdown spectroscopy**. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 2013. 407 p.
- 3 RANULFI, A. C. **Utilização de técnicas espectroscópicas no estudo e caracterização de doenças em citros: HLB (greening) e cancro cítrico**. 2014. 137 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

PG157

Structural and electronic properties of bulk graphite: a DFT investigation within van der Waals corrections

REGO, C. R. C.¹; TERESHCHUK, P.²; SILVA, J. L. F. da²; OLIVEIRA, L. N. de¹

celsoricardorego@bol.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - IFSC

²Instituto de Química de São Carlos - IQSC

Layered materials, ranging from oxides to semiconductors have attracted great interest due to the wide range of their technological applications. First-principles descriptions of such systems have however challenge theorists. In particular, Density Functional Theory (DFT) (1) has proved unable to describe accurately the weak interlayer separation. This shortcoming has been attributed to the lack of long range van der Waals (vdW) interactions. Several approaches have been proposed to describe of the vdW interactions. We study the significance of the vdW corrections proposed by Tkachenko-Scheffler (TS) with self-consistent screening (SCS) (2-3) in the structural and electronic properties of bulk graphite. Our calculations are based on the DFT-PBE+vdW^{TS+SCS} as implemented in VASP (1). With DFT-PBE we have obtained the equilibrium lattice constants equal to $a_0 = 2.46AA$ and $c = 8.32AA$, 0.2% and 24.1% off the experimental results respectively. The vdW^{TS+SCS} correction reduces the relative error in interlayer distance to 1.7%. Moreover, it yields a bulk modulus of 39.5 GPa, in excellent agreement with experiment 36.4 GPa. While the interlayer energy for PBE is 1.2 meV/atom, the PBE+vdW^{TS+SCS} value is 53.7 meV/atom, within the range of the experimental results. Relative to the PBE computation with PBE+vdW^{TS+SCS}, we found the following changes in the band structure (*i*) the interlayer distance plays a crucial role in the splitting of the π and σ states (e.g., $\Gamma\sigma_1$, $\Gamma\sigma_2$, $\Gamma\pi_1$, $\Gamma\pi_2$), (*ii*) the band gap changes from 0 to 0.34 eV, and 0, 2.14 eV. Our results show clearly that DFT-PBE+vdW^{TS+SCS} provide a great improve in the computation of electronic properties of layered materials.

Keywords: Density functional theory. van der Waals corrections. Graphite.

Referências:

- 1 PERDEW, J. P. ; BURKE, K.; EMZERHOF, M. Generalized gradient approximation made simple. **Physical Review Letters**, v.77,p.3865, Oct.1996.
- 2 TKATCHENKO, A.; SCHEFFER, M. Accurate molecular van der Waals interactions from ground-state electron density and free-atom reference data. **Physical Review Letters**, v.102, 073005, 2009.doi: 10.1103/PhysRevLett.102.073005.
- 3 TKATCHENKO, A.; DISTASIO JUNIOR, R. A.; CAR, R.; SCHEFFER, M. Accurate and efficient method for many-body van der Waals Interactions. **Physical Review Letters**, v.108, p.236402, 2012.doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.236402>.

PG158

Seleção, identificação e produção de xiloses isomerases importantes na produção de bioetanol

REIS, C. V.¹; CAMILO, C. M.¹; POLIKARPOV, I.¹

caio.reis@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Para tornar a produção de etanol de segunda geração economicamente sustentável, é imprescindível utilizar fração hemicelulósica. (1) As pentoses que compõem a hemicelulose não são fermentadas pelas leveduras (*Saccharomyces cerevisiae*) utilizadas pela indústria brasileira. A xilose, fração predominante da hemicelulose, pode ser robustamente convertida pela ação de xilose isomerases (XIs) em xilulose, que, por sua vez, é facilmente fermentada pela *S. cerevisiae*. Um fato importante a se considerar é a busca por uma ação conjunta e local entre enzimas que participam da quebra geral da biomassa em açúcares simples e as leveduras, tornando o processo como um todo otimizado e mais simples. Entretanto, um dos problemas presentes é a questão das temperaturas/pHs ótimos de cada enzima e leveduras serem muito distintos, impedindo uma produção com alto rendimento e custo reduzido. Considerando esse fato, a seleção de diferentes XIs para estudo possibilitará reconhecer e estabelecer um arcabouço molecular que rege a ação dessas enzimas em determinadas condições, permitindo direcionar, através de mutações sitio-dirigidas, condições compatíveis às leveduras. Para tanto, foram selecionadas diversas sequencias de genes que codificam para XI, de diferentes microrganismos. O método de *highthroughput screening* foi utilizado, permitindo a amplificação em larga escala desses *hits*. As amplificações bem sucedidas levaram à produção da proteína codificada, e essas logo em seguida foram submetidas aos testes de cristalização e de atividade, a fim de se obter um banco de dados ligando estrutura e atividade dessas XIs. Até o momento foram expressas de forma solúvel 25 XIs e 4 conjuntos de dados por difração de raios-X foram coletados.

Palavras-chave: Xilose isomerase. Bioetanol. Hemicelulose.

Referências:

1 PANDEY, A; SOCCOL, C. R.; NIGAM, P.; SOCCOL, V. T. Biotechnological potential of agro-industrial residues: sugarcane bagasse. **Bioresource Technology**, v.74, n. 1, p. 69-80, 2000.

PG159

Avaliação do dano em terapia fotodinâmica com luz intensa pulsada com diferentes fotossensibilizadores

REQUENA, M. B.¹; NARDI, A. B.²; ESCOBAR, A.²; ROCHA, R. W.²; FORTUNATO, T. C.¹; WEIS, P. T.³; BAGNATO, V. S.¹; MENEZES, P. F. C.¹

michelle@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias de Jaboticabal - UNESP

³Centro Universitário Central Paulista - UNICEP

A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma modalidade terapêutica que envolve a interação de um fotossensibilizador, oxigênio molecular do tecido e uma fonte de luz, estas interações promovem a morte das células por necrose ou apoptose. A realização da TFD com Luz Intensa Pulsada (LIP) vem sendo utilizada recentemente(1-2), portanto, é necessário a realização de experimentos para entender os mecanismos físicos envolvidos ao utilizar este tipo de fonte de luz, além de tentar otimizar a técnica ao realizar testes com diferente fotossensibilizadores. A pele de suínos é um modelo de pele bastante utilizado, tendo em vista que mimetiza as características da pele humana. (3) Para este trabalho, optou-se utilizar um modelo de pele sadia, de suínos jovens, já que as características ópticas do tecido são semelhantes ao tecido humano. Utilizar modelos de tecido saudável justifica-se pela elucidação de mecanismos de forma mais efetiva devido à baixa variabilidade de parâmetros estudados. Os testes em animais são de extrema importância para adequar os parâmetros de protocolos clínicos quanto às melhores combinações de fotossensibilizadores com a fonte de luz adequada para a Terapia Fotodinâmica. Como sistema de iluminação neste estudo, empregou-se um equipamento comercial (Pulse Intense Light - HKS801), constituído por uma lâmpada de xenônio. Foram utilizados dois animais com seis meses de idade e aproximadamente 20 Kg, que permaneceram alojados na Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias (FCAV) da UNESP de Jaboticabal. Todos os procedimentos experimentais foram realizados após a anestesia do animal. A tricotomia padrão foi feita por meio de lâmina e creme de barbear e fixou-se máscaras. Aplicou-se os cremes cosméticos com os precursores de PpIX: ALA, Metil-ALA (M-ALA) e uma MISTURA de 50% de ambos; soluções contendo ALA, M-ALA, uma MISTURA de 50% de ambos, PpIX, ICG, PG e PDZ diluídos em solução de soro fisiológico foram aplicados utilizando a injeção sem agulha (SAFE INJECT). Após 3 horas, foi realizada a Terapia Fotodinâmica com Luz Intensa Pulsada. Todas as regiões nas quais foram realizados os experimentos permaneceram protegidas da luz ambiente até o momento da eutanásia do animal. Após este processo, antes que fossem coletadas as biópsias para a análise histológica, foram realizadas as imagens de campo amplo das lesões. Com estas imagens, foi possível mensurar o dano causado em cada variação do tratamento através de uma rotina escrita em Matlab® (The MathWorks, EUA) e compará-lo com as imagens das lâminas histológicas. É importante avaliar a resposta da TFD com luz intensa pulsada, bem como comparar os resultados obtidos da TFD com LIP com os resultados encontrados na literatura da TFD tradicional com lasers e/ou LEDs. De modo geral o trabalho visa padronizar a TFD com LIP tornando-a uma técnica efetiva para os diferentes tipos

de fotossensibilizadores presentes no mercado. A utilização da TFD com LIP possibilita a potencialização da ativação fotoquímica dos fotossensibilizadores através da ativação múltipla de bandas de um mesmo fotossensibilizador bem como possibilidade de associação de fotossensibilizadores em *blends*. A análise quantitativa do dano fotodinâmico está em fase de processamento.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Luz intensa pulsada. Fotossensibilizadores.

Referências:

- 1 HAEDERSDAL, M.; TOGSVERD-BO, K.; WULF, H. C. Evidence-based review of lasers, light sources and photodynamic therapy in the treatment of acne vulgaris. **Journal of the European Academy of Dermatology and Venereology**, v. 22, n. 3, p. 267-278, Mar. 2008.
- 2 STRASSWIMMER, J.; GRANDE, D. J. Do pulsed lasers produce an effective photodynamic therapy response?. **Lasers in Surgery and Medicine**, v. 38, n. 1, p. 22-25, Jan. 2006.
- 3 GOFF, B. A.; BACHOR, R.; KOLLIAS, N.; HASAN, T. Effects of photodynamic therapy with topical application of 5-aminolevulinic acid on normal skin of hairless guinea pigs. **Journal of Photochemistry and Photobiology B**, v. 15, n. 3, p. 239-251, Aug. 1992.

PG160

The use of gold nanorods for electrochemical sensing of phenolic compounds in environmental and biological samples

RIBOVSKI, L.¹; JANEGITZ, B. C.²; MARANGONI, V. S.¹; SANTOS, F. A.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

laisribovski@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC - Campus Blumenau

Gold nanomaterials have proved to be excellent materials for signal amplification in electrochemical biosensors. Gold nanorods (AuNR), for example, exhibit interesting properties such as biocompatibility and high superficial area. (1) The determination of phenolic compounds can be important for environmental and medical. Here, a new electrochemical biosensor to detect phenolic compounds using tyrosinase (Tyr), AuNR and Screen-printed carbon electrodes (SPCE) is described. A film containing poly(amide amine) generation 4 (PAMAM) and AuNR (1:10) was prepared via casting on the carbon surface. (2) Subsequently, the AuNR-PAMAM/SPCE electrode was modified with a self-assembled monolayer (SAM) prepared using cystamine and glutaraldehyde followed by Tyr immobilization. To verify the direct electron transfer between the surface electrode and the enzyme active site, cyclic voltammetry was performed. Values for the transfer coefficient and apparent heterogeneous electron transfer rate constant were found to be 0.64 and 0.037 s⁻¹, respectively. The linear range for detection of catechol and dopamine was 2.8 to 30.3 $\mu\text{mol L}^{-1}$ and 27.8 to 448.7 $\mu\text{mol L}^{-1}$, respectively. The detection limit was found to be 1.0 $\mu\text{mol L}^{-1}$ for catechol and 10 $\mu\text{mol L}^{-1}$ for dopamine. The results suggest that Tyr-AuNR-PAMAM biosensor is promising for application in real samples in loco and the gold nanorods have shown to be a good alternative for electrochemical sensors modification.

Keywords: Gold nanorod. Biosensor. Screen-printed electrode.

Referências:

1 JANEGITZ, B. C. et al. Direct electrochemistry of tyrosinase and biosensing for phenol based on gold nanoparticles electrodeposited on a boron-doped diamond electrode. **Diamond and Related Materials**, v. 25, p. 128-133, 2012. doi: 10.1016/j.diamond.2012.02.023.

2 FORTI, J. C. et al. Development of novel bioanodes for ethanol biofuel cell using PAMAM dendrimers as matrix for enzyme immobilization. **Biosensors & Bioelectronics**, v. 26, n. 5, p. 2675-2679, 2011. doi: 10.1016/j.bios.2010.05.011.

PG161

Antimicrobial polyelectrolytes in action - investigating their molecular Interactions with cell membrane models (Langmuir Films) using the surface nonlinear SFG spectroscopy

RIMOLI, C. V.¹; SENRA, T. D. A.²; CAMPANA FILHO, S. P.²; MIRANDA, P. B.¹

cvrimoli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

The increasing microorganism resistance to antibiotics is a matter of global concern. In this context, it is evident that research on new antimicrobials and strategies are crucial. Antimicrobial Polymers have many advantages when compared to other small biocides: increased lifetimes, potency, specificity and lower residual toxicity. (1) In addition, some polymers are amphipathic (they self-assemble into nanostructures in liquids), others can be functionalized, and a few have good optical properties for photodynamical action. Thus, it is clear that they have great potential for technological applications. For example, antimicrobial coating of solid substrates such as medical devices - e.g. catheters - can avoid contamination. It is also possible to increase the shelf life of foods (antimicrobial packings) or to create textile products (antimicrobial or aesthetic clothing) with these polymers. One could use amphipathic polymers for water treatment or for controlled drug delivery as well. In particular, water-soluble derivatives of chitosan, such as Quaternary Ammonium salt of Chitosan (QCS), are Cationic Polyelectrolytes which are promising candidates to wide-spectrum antimicrobial agent (fungi, gram positive and gram negative bacteria).(2) Differently from its precursor (chitosan, which is mainly bioactive at acidic pH), QCS remains cationic - and therefore active - at physiological pH. Nevertheless, the exact mechanism by which these polymers act on the cell membranes remains unknown at the molecular level. This work aims at unveiling these antimicrobial molecular interactions. We are performing an Interface-Specific Nonlinear Vibrational Spectroscopy called Sum-Frequency Generation (SFG) Spectroscopy on a biomimetic cell membrane model (Langmuir film of the lipids DPPC and DPPG). (3) SFG Spectroscopy is perfect for this type of analysis because it collects only the vibrational spectrum of the interfacial molecules (QCS and Langmuir film). No signal from the QCS molecules in solution (centrosymmetric media) is detected by this technique. It may provide information about the conformation and order of membrane lipids and also their interaction with QCS adsorbed from solution.

Keywords: SFG spectroscopy. Antimicrobial polymers. Langmuir films.

Referências:

1 KENAWY, E. R.; WORLEY, S. D.; BROUGHTON, R. The chemistry and applications of antimicrobial polymers: a state-of-the-art review. **Biomacromolecules**, v. 8, n. 5, p. 1359-1384, 2007.

2 BRITTO, D.; GOY, R. C.; CAMPANA FILHO, S. P.; ASSIS, O. B. G. Quaternary salts of chitosan:

history, antimicrobial features, and prospects. **International Journal of Carbohydrate Chemistry**, v. 2011, p. 1-12, 2011. doi: <http://dx.doi.org/10.1155/2011/3125392011>.

3 VOLPATI, D. et al. Vibrational spectroscopy for probing molecular-level interactions in organic films mimicking biointerfaces. **Advances in Colloid and Interface Science**, v. 207, .p. 199-215, 2014. doi: 10.1016/j.cis.2014.01.014. Epub 2014 Jan 30.

PG162

Synthesis and characterization of the microwave ceramics based on complex perovskite $(\text{Ba},\text{M})(\text{B}',\text{Nb})\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{La}, \text{Sr}$ and $\text{B}' = \text{Ca}, \text{Cd}$)

RODRIGUES, J. E. F. S.¹; BEZERRA, D. M.²; SANTA ROSA, W.³; HERNANDES, A. C.¹

rodrigues.joaaoelias@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

³Departamento de Física - UFSCar

$\text{A}_3\text{B}'\text{B}''\text{O}_9$ -type perovskite ($\text{A} = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$; $\text{B}' = \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Zn}, \text{Ni}, \text{Co}$ or Cd ; $\text{B}'' = \text{Nb}, \text{Ta}$) are materials widely applied as resonators and filters for wireless communication technologies owing mainly to their high permittivities and low dielectric losses in the range of micro- and millimeter-waves. (1) Tantalum-based ceramics such as $\text{Ba}_3\text{ZnTa}_2\text{O}_9$ and $\text{Ba}_3\text{MgTa}_2\text{O}_9$ boast very attractive Q_u values which further improve device selectivity and bandwidth. The high cost of tantalum oxide, however, increases the final cost of these devices, making the substitution of tantalum by niobium in dielectric ceramics an excellent alternative as Nb^{+5} and Ta^{+5} ions have the same ionic radii. Also, these systems are employed as ferroelectric/relaxor ceramics, high temperature proton conductors for fuel cells, tunable dielectrics, and photocatalysts which split water into H_2 and O_2 under ultraviolet light irradiation. These oxides belong to the class of complex perovskites, being classified into disordered and ordered. Usually, disordered one adopts a cubic unit cell with space group O_h^1 ($\text{Pm}\bar{3}\text{m}$, #221) in which B' and B'' ions are randomly distributed. The ordered structure has a trigonal cell that belongs to the space group D_{3d}^3 ($\text{P}\bar{3}\text{m}1$, #164), where the cations B'^{2+} and B''^{5+} are alternately distributed in the form $(\text{B}'\text{-B}''\text{-B}''\text{-B}'\text{-B}''\text{-B}'')$ in $\langle 111 \rangle$ direction of the cubic cell. (1) According to the literature, there is an extensive investigation on the dielectric constant (ϵ), quality factor (Q) and temperature coefficient of resonant frequency (τ_f) values for $\text{Ba}_3\text{Zn}(\text{Nb},\text{Ta})_2\text{O}_9$, $\text{Ba}_3\text{Mg}(\text{Nb},\text{Ta})_2\text{O}_9$, $\text{Sr}_3\text{Zn}(\text{Nb},\text{Ta})_2\text{O}_9$, $\text{Ba}_3\text{CoNb}_2\text{O}_9$, $(\text{Ba},\text{La})(\text{Mg},\text{Ta})\text{O}_3$ systems. However, to the best of our knowledge, there is any report for $\text{B}' = \text{Ca}, \text{Cd}$ and $\text{B}'' = \text{Nb}$ complex oxides. In the present work, we deal with the synthesis and preparation of the microwave ceramics based on complex perovskite $(\text{Ba},\text{M})(\text{B}',\text{Nb})\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{La}, \text{Sr}$ and $\text{B}' = \text{Ca}, \text{Cd}$). Our main aims are to evaluate the relation between the crystal structure (ordering features) and its influence in the microwave properties (dielectric resonator performance). The ceramics have been synthesized via conventional solid state method, in which the calcined powders are uniaxially and then isostatically compacted. X-ray powder diffraction and Raman spectroscopy are employed to evaluate the ordering features of the ceramics. Until now, our results indicate the strong sintering temperature dependence of the structural ordering parameters, besides the difficulty to obtain high dense ceramics. To solve this problem, a complete study on the sintering process has been performed in order to evaluate the microwave dielectric properties of the ceramics correctly.

Keywords: Microwave ceramics. Complex perovskite. Structural ordering.

Referências:

1 SEBASTIAN, M. T. **Dielectric materials for wireless communication**. Oxford: Elsevier, 2010. 688 p.

PG163

Increasing the superficial homogeneity and ALA-induced PpIX production in pig skin

RODRIGUES, P. G. S.¹; MENEZES, P. F. C.¹; PAOLILLO, F. R.¹; REQUENA, M. B.¹; KURACHI, C.¹; BAGNATO, V. S.¹

phamilla@ymail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Photodynamic Therapy (PDT) is a noninvasive treatment that use some drugs and light to kill cancer cells. (1) The limitations of topical photodynamic therapy (PDT) using 5-aminolevulinic acid (ALA) includes the poor ability of the cream to penetrate biological barriers of skin. (2) Given this, microneedles have received attention in transdermal drug delivery due its low costs in creating micropores. (3) This research aims to enhance the photodynamic therapy efficiency using ALA by creating microchannels with microneedle rollers. The study was done in vivo using porcine skin model. After creating the microholes (different lengths), ALA cream was applied and the kinetics of the PpIX production was monitored using widefield fluorescence imaging and fluorescence spectroscopy. By the wide-field fluorescence of the skin surface and spectra analysis, was observed that there was a greater homogeneity and production of the PpIX in the porcine skin. The widefield fluorescence showed higher count of red pixel in the images when the topical application is associated with microholes. Currently, fluorescence images by microscopy and histopathology are being performed to evaluate the depth and profile of the PpIX fluorescence. These results indicates that this device can be used to improve the PpIX production, reducing the duration of therapy, or the ALA concentration necessary for an effective therapy. In addition, greater homogeneity of PpIX production in the area to be treated reduces the chances of recurrent tumor.(FUNDING SUPPORT: CAPES/CNPQ)

Keywords: PpIX production. Photodynamic therapy. PpIX homogeneity.

Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Novas técnicas ópticas para as áreas da saúde**. São Paulo: Livraria da Física, 2008.

2 NICOLODELLI, G.; ANGARITA, D. P. R.; INADA, N. M.; TIRAPELLI, L. F.; BAGNATO, V. S. Effect of photodynamic therapy on the skin using the ultrashort laser ablation. **Journal of Biophotonics**, v. 7, n. 8, p. 631-637, 2014.

3 GOMMA, Y. A.; MORROW, D. I. J.; GARLAND, M. J.; DONNELLY, R. F.; EL-KHORDAGUI, L. K.; MEIDAN, V. M. Effects of microneedle length, density, insertion time and multiple applications on human skin barrier function: assessments by transepidermal water loss. **Toxicology in Vitro**, v. 24, n. 7, p. 1971-1978, 2010.

PG164

Planejamento baseado na estrutura da enzima PtpA de *Mycobacterium tuberculosis*: modelo farmacofórico e triagem virtual

RODRIGUES, V. K. T.¹; GUIDO, R. V. C.¹

vahkiraly@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Tuberculose é uma doença infecto-contagiosa causada pelo bacilo *Mycobacterium tuberculosis*. O número de pessoas acometidas com a doença é significativo, chegando a estimativa de 8,6 milhões em 2012 (OMS - 2013). O surgimento de cepas resistentes aos fármacos utilizados no tratamento padrão atual é alarmante, portanto, faz-se extremamente necessário a identificação de novos alvos moleculares e fármacos que sejam eficazes frente à essas cepas resistentes. (1) Para tanto, a partir da análise do genoma do *M. tuberculosis*, foram identificadas duas proteínas tirosinas fosfatases (PtpA e PtpB), responsáveis pela sobrevivência nos macrófagos do hospedeiro. (2) A inativação dos genes que codificam essas proteínas inviabilizou a sobrevivência do *M. tuberculosis* nos macrófagos, validando as Ptps como alvos terapêuticos atrativos para o desenvolvimento de novos fármacos. (2-3) Nesse trabalho, foram iniciados os estudos de planejamento baseado na estrutura do alvo receptor (SBDD, do inglês, *structure-based drug design*) com a enzima PtpA. Nesse sentido, foi utilizada a estrutura 3D da PtpA (PDB ID, 1U2P) para estudos de modelagem molecular e construção de um modelo farmacofórico 3D. A primeira etapa do processo de construção do modelo farmacofórico 3D foi o mapeamento do sítio catalítico da enzima alvo (PtpA) com o auxílio de sondas moleculares capazes de identificar as regiões favoráveis para interação com grupos hidrofóbicos, doadores e aceptores de ligação de hidrogênio. Para tanto foi utilizado o programa Surflex-Dock através da aplicação do protocolo "protomol" para o mapeamento das regiões favoráveis para interação com sondas moleculares específicas (i.e., C=O, NH e Csp3). A avaliação sistemática do sítio catalítico identificou: (i) três regiões favoráveis para interação com grupos doadores de ligação de hidrogênio (cadeia lateral da His 49, Asp90 e Asp126); (ii) três regiões favoráveis para interação com grupos aceptores de ligação de hidrogênio (cadeia principal da Gly13, Ile15, Cys16 e Asp126 e cadeia lateral da Thr12, Arg17, His93 e Tyr129); e (iii) uma região favorável para interação com grupos hidrofóbicos (cadeia lateral da Ile15, Cys16 e Tyr128). Essa hipótese farmacofórica foi avaliada utilizando-se as ferramentas de busca 3D do programa UNITY (plataforma SYBYL 8.0). A base de dados utilizada foi o subconjunto "Leads-Now" da base de dados ZINC (43.910 compostos) que apresenta características físico-químicas atrativas para a descoberta de candidatos a novos compostos líderes. Os modos de ligação dos candidatos a ligantes foram modelados no sítio ativo da PtpA com auxílio do programa de docagem molecular Glide. Processos de minimizações de energia foram aplicados para validar as conformações geradas capazes de satisfazer as restrições impostas pelo modelo farmacofórico. Um conjunto de 10 candidatos a ligantes que apresentaram conformações de menor energia complementares ao modelo farmacofórico 3D foram selecionados para os ensaios experimentais de inibição. O modelo farmacofórico gerado é uma ferramenta importante no entendimento das interações intermoleculares predominantes nesse sistema de alta complexidade, sendo útil na integração com técnicas de ensaio virtual e síntese planejada para identificação e obtenção de novos inibidores para a PtpA como candidatos a novos fármacos para o tratamento da tuberculose.

Palavras-chave: *Mycobacterium tuberculosis*. Proteínas tirosinas fosfatases . Farmacóforo.

Referências:

1 DE OLIVEIRA, K. N. et al. Sulfonyl-hydrazones of cyclic imides derivatives as potent inhibitors of the *Mycobacterium tuberculosis* protein tyrosine phosphatase B . **MedChemComm**, v.2, n. 6, p. 500-504, 2011. doi: 10.1039/C0MD00253D .

2 MASCARELLO, A. et al. Inhibition of *Mycobacterium tuberculosis* tyrosine phosphatase PtpA by synthetic chalcones: Kinetics, molecular modeling, toxicity and effect on growth. **Biorganic & Medicinal Chemistry**, v.18, n.11, p. 3783-3789, 2010.

3 GRUNDNER, C. et al. Structural basis for selective inhibition of *Mycobacterium tuberculosis* protein tyrosine phosphatase ptpB. **Structure**, v.15, n.4, p. 499-509, 2007.

PG165

Toward the second generation of brazilian atomic fountain

RODRIGUEZ, A.¹; HOLANDA, G.²; MULLER, S.²; BAGNATO, V. S.¹; MAGALHÃES, D. V.²

andresro@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Engenharia de São Carlos - USP

The main goals of this work are the experiment using two frequencies to verify a theoretical prevision of the Ramsey method, the development of new elements for the optical and micro-wave systems and, the project and execution of a new vacuum system for the cold atoms fountain. The Ramsey Interferometry of two frequencies must be performed including the systematic characterization of the method, as well as the evaluation of its consequences to the operation as time and frequency standard. New developments at the atom fountain will be performed in parallel, since it will requires external work for a confection of a vacuum chamber and a structure for new diode laser systems. Besides the design, manufacture and testing of the new vacuum chamber, it must be performed performance tests for the new diode lasers. The preparation cavity is already at the free flying tower, and currently we can launch to enough heights to use the two cavities. We already have another microwaves synthesizer, with similar performance of the one we are using today. Another implementation to be made refers to the diode laser used on the detection. To minimize the noise measures, induced by the intensity of the detection laser beam, it must be developed a locking of intensity to this system. This locking will be made using an acusto-optical modulator, with feedback of the monitoring signal of the detection beam.

Keywords: Atomic clock. Frequency standard. Cold atoms.

Referências:

1 MAGALHÃES, D. V. et al. Progress toward a Cs-133 fountain as frequency standard in Brazil. **Modern Trends in Laser Physics**, v. 14, n. 2, p. 150- 153, 2004.

2 SEIDEL, D.; MUGAS, J. G. Two-frequency Ramsey interferometry. **Physical Review A**, v. 75, n. 2, p. 023811-1-023811-7, 2007.

PG166

Crystal structure of *Schistosoma mansoni* hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase isoform 1 (HGPRT1)

ROMANELLO, L.¹; SOUZA, J. R. T.¹; BIRD, L.²; NETTLESHIP, J.²; OWENS, R.²; REDDIVARI, Y.²; BRANDÃO NETO, J.³; PEREIRA, H. M.¹

larissa.romanello@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Oxford Protein Production Facility - OPPF

³Harwell Science and Innovation Campus - Diamond Light Source

Schistosoma mansoni is the parasite responsible for schistosomiasis, a disease that affects about 207 million people worldwide. (1) *S. mansoni* lacks the purine de novo synthesis pathway, thus depending entirely on the purine salvage pathway to supply its demand for purines. The purine salvage pathway has been reported as a potential target for developing new drugs against schistosomiasis. Hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase (HGPRT) (Smp_103560) is a key enzyme in this pathway and is the only validated enzyme target of the pathway. *S. mansoni* possess three different isoforms for HGPRT which catalyzes the PRPP-dependent conversion of hypoxanthine to inosine monophosphate or guanine to guanosine monophosphate. (2) Here we present the structure of isoform 1 of HGPRT. HGPRT1 was amplified, cloned into vector pOPIN(F), expressed in *E. coli* Lemo 21(DE3) grown in Power Broth induced with 1mM IPTG, and purified by nickel column and gel filtration at the Oxford Protein Production Facility in Harwell (United Kingdom). Robotic crystallization trials were performed and SmHGPRT1 (231 amino acids; 26kDa) crystallized in several conditions of the Morpheus crystallization kit: A4, A8, A9, and C9. HGPRT1 crystals appear only when protein is incubated with inosine monophosphate (IMP) for about 24h. The crystals, however, were very small, approximately 30 micrometers on their largest dimension. After the third collection, after screening more than 100 crystals, 21 datasets were collected on the macromolecular crystallography beam lines I24 and I04-1 at Diamond Light Source (United Kingdom) at 2.97 - 4.11 angstrom resolution. The structure was solved by the program *Phaser* using human HGPRT (PDB 1HMP; 49% identity) as a search model. The refinement is being carried out by the program *Phenix*. The better dataset to 2.97 angstrom resolution, contains 2,5mg/mL enzyme incubated with 2mM of IMP in condition A4 from Morpheus at 18°C. A solution was obtained for HGPRT1 belongs space group P212121 with four monomers in the asymmetric unit (ASU). The density map is acceptable for the resolution but a great manual work of interpretation is necessary for the refinement of this structure. These results demonstrate that it is possible to crystallize and collect data from SmHGPRT. A major effort will be undertaken to improve the size and diffraction power of HGPRT crystals as well as in the resolution of the structure of HGPRT in other space groups. This structure will increase the important structural information available about the *Schistosoma mansoni* purine salvage pathway.

Keywords: Hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase. *Schistosoma mansoni*. Purine salvage pathway.

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Report on Schistosomiasis**. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs115/en/>> Acesso em: 20 ago. 2014 .
- 2 SENFT A. W.; MIECH R. P.; BROWN P. R.; SENFT, D. G. Purine metabolism in *Schistosoma mansoni*. **International Journal for Parasitology**, v. 2, n. 2, p. 249-260, 1972.

PG167

Redes complexas aplicadas ao estudo de interação de proteínas

RONQUI, J. R. F.¹; TRAVIESO, G.¹

jose.ronqui@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Redes complexas são modelos matemáticos utilizados para estudar sistemas compostos por elementos principais (chamados de nós ou vértices) que apresentam algum tipo de relação (representadas pelos links ou arestas) entre si. (1) Na natureza existem diversos sistemas que apresentam essas características como redes sociais, ou de transporte ou ainda redes de distribuição de energia. Na área de biologia onde os sistemas complexos são cruciais pois em muitos casos é impossível entender-se completamente os fenômenos presentes neles analisando-se individualmente as partes que os compõem. Como alguns exemplos de redes biológicas podemos citar: redes de interação gênica, redes metabólicas, redes ecológicas, redes de resíduos de proteínas e redes de interações entre proteínas. (2) Apesar da importância da área, atualmente existem poucos trabalhos desenvolvidos aplicando as técnicas da teoria de redes e sistemas complexos no estudo e análise de sistemas biológicos. Como projeto de pesquisa objetivamos estudar redes complexas e suas características topológicas e dinâmicas aplicadas ao estudo de interação de proteínas. (3) Utilizando essas propriedades e as diversas medidas desenvolvidas para redes complexas, compararemos as diferentes características dessas redes biológicas contrastando-as com outras reais e modelos teóricos. Como ponto de partida, procuramos diferenciar as redes de organismos distintos, usando as correlações entre suas medidas de centralidade como características da rede - método este que já se mostrou eficaz para caracterizar outros tipos de rede. Dessa forma, podemos realizar comparação de similaridade entre as redes e analisar as mudanças nas relações entre seus nós e ligações paralelamente com a evolução desses organismos, o que torna este tipo de rede uma excelente maneira de validar a metodologia anterior. Além disso, informações importantes sobre a topologia e dinâmica observadas nesses sistemas complexos podem servir como base para o desenvolvimento de novos modelos probabilísticos para construção de redes com características mais fiéis àquelas encontradas na redes reais do que os modelos atuais. As redes de proteínas serão montadas a partir das interações entre proteínas reportadas por bancos de dados como o STRING ou o DIP, por exemplo; e para as simulações e medidas e comparação com modelos da literatura, utilizaremos bibliotecas amplamente empregadas em redes como a networkx ou a igraph por exemplo. Esperamos que com este trabalho possamos desenvolver uma nova maneira de se classificar e estudar a evolução dos organismos utilizando as características presentes em suas redes de proteínas. Na parte de redes complexas nossos resultados podem contribuir para o desenvolvimento e aperfeiçoamento de modelos para representar este tipo de sistema, além disso como função e estrutura são intimamente relacionadas nesses sistemas, esperamos que através desse estudo também possamos caracterizar melhor a função de padrões estruturais recorrentes nesse tipo de sistema.

Palavras-chave: Redes complexas. Interação de proteínas. Caracterização de sistemas.

Referências:

- 1 NEWMAN, M. E. J. **Networks**: an introduction. Oxford: Oxford University Press, 2010.
- 2 ESTRADA, E. **The structure of complex networks**: theory and applications. Oxford: Oxford University Press, 2011.
- 3 LAS RIVAS, J.; FONTANILLO, C. Protein-protein interactions essentials: key concepts to building and analyzing interactome networks. **PloS Computational Biology**, v. 6, n. 6, p. e1000807-1-e1000807-8, 2010.

PG168

Evaluation of skin collagen fibers from second-harmonic generation images

ROSA, R. G.I T.¹; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹

ramongabriel.tr@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nonlinear optical microscopy is an important technique that allows the acquisition of three-dimensionally resolved images. Unlike confocal microscopy, the depth resolution is not achieved by the descanning optics but by the nonlinearity of the excitation process that reduces the photodamage effects and increase the penetration depth. These features make the multiphoton microscopes excellent tools for noninvasive, *in situ* investigation and characterization of structures in the skin. This technique also presents a high specificity for some biological structures. The high intrinsic second harmonic generation (SHG) of collagen structures has been widely used in the nonlinear microscopy for the analysis of mechanical properties of live tissues. The analysis of the SHG images of collagen fibers in the skin usually takes into account their mean diameters (1) but one important parameter to be studied is the ordination of the fibers, (2) especially for wound healing and cosmetics. However, the commercial nonlinear microscopes design does not allow *in vivo* imaging and this prevents the investigation of important phenomena in complex live systems over time. We used a custom-built nonlinear microscope designed to allow simultaneous SHG and two photon excited fluorescence (TPEF) of *in vivo* and *ex vivo* tissue samples. (3) We also report on a novel method to analyse the two-dimensional discrete autocorrelation function of SHG images of skin collagen fibers.

Keywords: Collagen fibers. SHG microscopy. Autocorrelation function.

Referências:

1 RAUB, C. B.; UNRUH, J.; SURESH, V.; KRASIEVA, T.; LINDMO, T.; GRATTON, E.; TROMBERG, B. J.; GEORGE, S. C. Image correlation spectroscopy of multiphoton images correlates with collagen mechanical properties. **Biophysical Journal**, v. 94, n. 6, p. 2361-2373, 2008.

2 RAO, R.; MEHTA, M.; LEITHEM, S.; TOUSSAINT JR., K. Quantitative analysis of forward and backward second-harmonic images of collagen fibers using Fourier transform second-harmonic-generation microscopy. **Optics letters**, v. 34, n. 24, p. 3779-3781, 2009.

3 PRATAVIEIRA, S.; BUZZÁ, H. H.; JORGE, A. E.; GRECCO, C.; PIRES, L.; COSCI, A.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. Assembly and characterization of a nonlinear optical microscopy for *in vivo* and *ex vivo* tissue imaging. **Proceedings SPIE**, v. 8948, p. 894828-1-894828-6, 2014. doi: 10.1117/12.2037757.

PG169

Caracterização Enzimática e Estrutural do domínio EAL da STM 3615 de *Salmonella enterica*

ROSSETO, F. R.¹; NAVARRO, M. V. A. S.¹

rosseto@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A formação de biofilmes bacterianos é um fenômeno bem conhecido, caracterizado pela formação de uma comunidade bacteriana estática, embebida em uma matriz exopolimérica. No entanto, apenas recentemente esse processo tem sido elucidado em nível molecular, revelando uma nova molécula sinalizadora, c-di-GMP, como um regulador chave da mobilidade, adesão celular e síntese da matriz exopolissacarídica do biofilme. (1) Os domínios proteicos que catalisam a síntese (GGDEF) e degradação (EAL e HD-GYP) de c-di-GMP tem sido identificados em grande quantidade quase em todos os genomas bacterianos sequenciados até hoje. Proteínas transmembranares com um domínio periplasmático (DP), seguido de uma única hélice transmembranar (TM) e domínios HAMP, GGDEF e EAL na porção citoplasmática tem sido identificados em diversos organismos, como por exemplo a LapD de *Pseudomonas fluorescens*, (2) um receptor transmembranar de c-di-GMP essencial para formação de biofilme sob condições de estresse nutricional. Porém, diferentemente da LapD que possui os domínios GGDEF e EAL degenerados, observamos que o domínio EAL está na forma ativa na proteína STM3615 de *Salmonella enterica*, que possui a mesma arquitetura da LapD e portanto uma série de características funcionais sobre essa sub-família de proteínas com arquitetura DP-TM-HAMP-GGDEF-EAL ainda precisam ser elucidadas. (3) Observando estas características, realizamos ensaios enzimáticos com o domínio EAL da STM3615 utilizando cromatografia de fase reversa e Calorimetria de Titulação Isotérmica (ITC), identificando os produtos através de espectrometria de massas. Para entender de forma ainda mais clara a função e funcionamento da fosfodiesterase, conjuntos de dados obtidos por cristalografia dos domínios GGDEF-EAL foram utilizados para resolver a estrutura através da técnica de dispersão anômala simples (SAD) em que estamos em passos de construção e análise do modelo, que nos fornecerá base para identificação do mecanismo de atividade enzimática.

Palavras-chave: c-di-GMP. Biofilme bacteriano. GGDEF-EAL.

Referências:

- 1 ROSS, P.; MAYER, R.; BENZIMAN, M. Cellulose biosynthesis and function in bacteria. **Microbiology Reviews**, v. 55, n. 1, p. 35-58, 1991.
- 2 GALPERIN, M. Y.; NIKOLSKAYA, A. N.; KOONIN, E. V. Novel domains of the prokaryotic two-component signal transduction systems. **FEMS Microbiology Letters**, v. 203, n. 1, p. 11-21, 2001.
- 3 HULKO, M.; BERNDT, F.; GRUBER, M.; LINDER, J. U.; TRUFFAULT, V. S.; CHULTZ, A.; MARTIN, J.; SCHULTZ, J. E.; LUPAS, A. N.; COLES, M. The HAMP domain structure implies helix rotation in



transmembrane signaling. **Cell** , v. 126, n. 5, p. 929-40, 2006.

PG170

Engenharia de potenciais confinantes em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades

ROSSETTI, R. F.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

rafael.rossetti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste projeto é a engenharia de potenciais confinantes em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades. Especificamente, pretendemos implementar os potenciais de Morse e anti-Morse em armadilhas iônicas, a partir do potencial harmônico de uma armadilha do tipo Paul, com foco na possibilidade de controle da correspondente energia de dissociação relacionada ao movimento vibracional do íon. Esta engenharia, que deve ser empreendida unicamente através dos processos de interação radiação-matéria, sem o recurso a qualquer campo externo adicional à armadilha, pode permitir-nos uma manipulação tal do espaço de estados vibracionais do íon que nos propicie novos ingredientes para a engenharia de interações entre estados eletrônicos e vibracionais do íon. (1,2) Consequentemente, pode igualmente propiciar novos ingredientes para a engenharia de reservatórios em armadilhas iônicas. No contexto da eletrodinâmica quântica de cavidades pretendemos, também na ausência de campos externos, aprisionar átomos neutros em cavidades cruzadas (com eixos ópticos perpendiculares entre si). Para isso, assim como nas armadilhas iônicas, devemos recorrer somente à física da interação radiação-matéria. Em particular, objetivamos a engenharia de interações entre um modo da cavidade e átomos de dois níveis que simulem acoplamento do tipo spin-órbita de Rashba ou Dresselhaus, dos quais decorrem o Zitterbewegung não-usual, responsável por órbitas helicoidais de partículas na ausência de campos magnéticos. (3) Por fim, temos também como objetivo a simulação quântica, em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades, de fenômenos como a excitação de Higgs, no primeiro sistema, e do zitterbewegung não-usual no segundo.

Palavras-chave: Simulação de potenciais confinantes. Armadilhamento de átomos neutros em EQC . Simulações em íons armadilhados.

Referências:

1 LEIBFRIED, D ; BLATT, R ; MONROE, C; WINELAND, D. Quantum dynamics of single trapped ions. **Reviews of Modern Physics** v. 75, n. 1, p. 281-324, 2003.

2 GERRITSMAN, R.; KIRCHMAIR, G.; ZHRINGER, F.; SOLANO, E.; BLATT, R.; ROOS, C. F. Quantum dynamics of the Dirac equation. **Nature**, v. 463, p. 68-71, 2010. doi: 10.1038/nature08688.

3 BERNARDES, E.; SCHLIEMANN, J.; LEE, M.; EGUES, J.C.; LOSS, D. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. **Physical Review Letters**, v. 99, n. 7, p. 076603-1-076603-4, 2007.

PG171

Multi-compounds transparent conducting oxides: the example of $\text{In}_2\text{O}_3\text{-SnO}_2$

SABINO, F. P.¹; SILVA, J. L. F.²; OLIVEIRA, L. N.¹

fernandopsabino@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Transparent conducting oxides (TCOs) combine high electrical conductivity and transparency of about 90% in the visible spectrum and are widely used in technological. (1) Nowadays, the most used TCO is $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Sn}$ (ITO) due to the excellent figures of merit of In_2O_3 . However ITO has high cost due to In scarcity, and hence there is great interest to reduce the amount of In. A possible solution is the use of multi-compounds, which combine In_2O_3 with a second oxide such as SnO_2 , ZnO , Ga_2O_3 . In this work, we have focused on the study of the ternary compound formed by the combination of In_2O_3 with SnO_2 employing density functional theory as implemented in the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP). For the exchange-correlation functional, we have employed the generalized gradient approximation and the hybrid HSE06 functional. The crystal structures for different compositions were constructed using a supercell based on the fluorite structure (face center cubic), from which we obtained cubic and hexagonal unit cells with compositions in the range from 28.8% to 95.2% In. From the lowest and high energy configurations for each composition, we found that the distribution of the O vacancies in the supercell and the tendency of the 6-fold Sn configurations play an important role in the stability of the crystal structures. From the heat of formation calculations, we found that three compositions are nearly degenerated in energy, namely, two compositions observed experimentally and a new structure candidate, which has not been observed yet. The density of states and the band-structure results indicated that, in structures with high In concentration, some O atoms create an occupied defect near the Fermi level, an arrangement not observed in the most stable structures. For both parent oxides, In_2O_3 and SnO_2 , we found a difference in the fundamental and optical band gap of 0.80 eV. This difference has also been observed in the multi-compounds, with an offset of 0.40-1.40 eV. Since the PBE functional underestimates the band gap, we have employed the hybrid functional, as a result of which the relative deviation from experiment decreased from 65% to 7.5%. Therefore, the $\text{In}_2\text{O}_3\text{-SnO}_2$ multi-compound combine the properties of the In_2O_3 and SnO_2 and in certain cases present new properties, such as an increase in the optical band gap offset. We have also identified a third structure, which may or may not have been experimentally observed, with composition $1\text{In}_2\text{O}_3\text{-1SnO}_2$.

Keywords: Transparent conducting oxides. Indium oxide. Tin oxide.

Referências:

1 NOMURA, K. et al. Room-temperature fabrication of transparent flexible thin film transistors using amorphous oxide semiconductors. **Nature**, v. 432, n. 7016, p. 488-492, 2004.

PG172

Antiferromagnetic interaction evidenced in "plastdoped" polyaniline (PANI-DDoEPSA)_{0.5} by Electron Spin Resonance

SANTANA, V. T.¹; WALMSLEY, L.²; DJURADO, D.³; TRAVERS, J. P.³; PRON, A.⁴; NASCIMENTO, O. R.¹

vstadeu@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Geociências e Ciências Exatas - UNESP - Rio Claro

³INAC/SPrAM - Grenoble – France

⁴University of the Technology - Warsaw – Poland

Polyaniline (PANI) protonated with plasticizers constitute a very interesting class of conducting polymers, combining reasonable environment stability and good mechanical properties. Electron Spin Resonance (ESR) has proven to be an important source of information on magnetic and conducting properties for this material (1-2) X-Band ESR performed in free standing films of polyaniline protonated with di-n-dodecyl ester of sulfosuccinic acid (PANI-DDoESSA)_{0.5} has shown a metal-semiconductor transition, an antiferromagnetic transition and evidence of weak ferromagnetism. (3) In this work, we performed X-band ESR in a film (thickness $d=35 \mu\text{m}$) of polyaniline protonated with 1,2-benzenedicarboxylic acid, 4-sulfo, 1,2-di(n-dodecyl) ester (PANI-DDoEPSA)_{0.5}. ESR intensity is proportional to the magnetic susceptibility. The magnetic behavior is described assuming a transition, around 75K, from Pauli susceptibility (metallic behavior) to a localized state (semiconductor behavior) in which spin 1/2 polarons behave as spin 1/2 dimers. For the magnetic field oriented either perpendicular or parallel to the plane of the film, a maximum in intensity is observed at 9.3 K with a subsequent decrease indicating the depopulation of the triplet state ($S=1$). The almost isotropic behavior is in contrast to (PANI-DDoESSA)_{0.5} (3) despite the proximity of the temperature of the maximum for both "plastdoped" PANI films.

Keywords: Antiferromagnetism. ESR. Conducting polymers.

Referências:

1 NASCIMENTO, O. R. et al. Magnetic behavior of poly(3-methylthiophene): metamagnetism and room-temperature weak ferromagnetism. **Physical Review B**, v. 67, p. 144422, 2003.doi: 10.1103/PhysRevB.67.144422.

2 DJURADO, D. et al. Magnetic field dependence of the magnetic susceptibility and the specific heat of the doped plasticized polyaniline (PANI-DB3EPSA)_{0.5}. **Journal of Physics: condensed matter**, v. 23, n. 20, p. 206004, 2011.

3 SANTANA, V. T. et al. Evidence of weak ferromagnetism in the doped plasticized polyaniline (PANI-DDoESSA)0.5 from electron spin resonance measurements. **Journal of Physics: condensed matter**, v. 25, n. 11, p. 116004, 2013.

PG173

Synthesis and characterization of amine-modified graphenes for sensors applications

SANTOS, F. A.¹; NOGUEIRA, V. H. R.¹; JANEGITZ, B. C.²; ZUCOLOTTI, V.¹

fabricioaps@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Theoretically proposed in 1935 and firstly isolated in 2004, graphene shows interesting properties, not found in any other carbon-based material. (1) Functionalization of graphene using amine-based groups can improve its use as thin films for sensors and biomedical applications, such as drug carriers and photo-hyperthermia without requiring the use of polymers, surfactants or any other organic solvent. Here we propose a new method for functionalization of chemically exfoliated graphene by using hydrothermal synthesis and reduction with sodium borohydride. The modified graphene was used in combination with polyamidoamine dendrimers (PAMAM-G2/G4) to build layered, self-assembled films on interdigitated electrodes using the layer-by-layer technique. Scanning electron microscopy (SEM) revealed a good dispersion of graphene flakes on the electrodes, without formation of aggregates. Zeta-potential showed a better stability of modified graphene in comparison to conventional reduced graphene oxide (RGO), traditionally employed for films fabrication. Our results showed a successful functionalization of graphene with amines groups, which exhibited a good stability in aqueous dispersions, making these materials excellent candidates for use in biosensors.

Keywords: Reduced graphene oxide. PAMAM. Layer-by-layer.

Referências:

1 GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. **Nature Materials**, v. 6, n. 3, p. 183-191, 2007.

PG174

Epidemiologia molecular de Enterobacteriaceae produtoras de KPC e outras beta-lactamases

SANTOS, J.¹; CAMARGO, I. L. B. C.¹

jessicadsanti@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A terapia antimicrobiana com carbapenens tem como alvo patógenos gram-negativos multirresistentes. Entretanto, a resistência de enterobactérias a ação dos carbapenens já é considerada um problema de saúde pública, sendo a produção de carbapenemases o principal mecanismo de resistência a esta classe de antimicrobiano. Neste estudo avaliaremos 47 amostras bacterianas potenciais produtoras de *Klebsiella pneumoniae* carbapenemase (KPC), isoladas de 41 pacientes no período de abril de 2011 a dezembro de 2013. Os isolados de sítios de infecções foram recolhidos de 9 hospitais diferentes, no estado de São Paulo e de Belo Horizonte, MG, e incluem exemplares de Enterobacteriaceae. A confirmação fenotípica foi baseada em teste de Hodge modificado e testes de disco difusão com inibidores e potencializador enzimático, indicando a presença das classes A, B e D de Ambler (1) nas amostras bacterianas. Detectamos o gene *blaKPC*, através de PCR, confirmando que apenas 9 amostras possuem o gene *blaKPC*. Os próximos passos são a detecção do gene *blaNDM* e demais genes responsáveis pela resistência à carbapenens, além da caracterização dos isolados de acordo com o perfil de clonalidade e determinação das linhagens bacterianas. Para todos os isolados será determinada a concentração inibitória mínima para carbapenens, cefalosporinas, ciprofloxacina, tigeciclina e polimixina B, por Etest ou microdiluição. Novos compostos do CIBFar serão testados em isolados selecionados para determinar o perfil de sensibilidade das amostras, a atividade bactericida/bacteriostática e a degradação do biofilme formado. O gene *blaKPC* será sequenciado e caracterizado quanto ao seu ambiente genético (transposon Tn4401). A caracterização dos plasmídeos com o gene *blaKPC* será baseada na detecção de grupos de incompatibilidade do plasmídeo (Inc) e pMLST de plasmídeos que fizerem parte de grupos Inc com esquema já estabelecido. Caracterizando molecularmente os isolados produtores de carbapenemases podemos saber se há uma dispersão clonal existente entre as espécies produtoras destas enzimas ou entre os plasmídeos presentes nestas bactérias. O resultado deste estudo pode oferecer opções de novos compostos, com atividade antimicrobiana, que poderão ser importantes fármacos no futuro.

Palavras-chave: *Klebsiella pneumoniae* carbapenemase. Beta-lactamase. Resistência microbiana.

Referências:

1 AMBLER, R. P. The structure of beta-lactamases. **Philosophical Transactions of The Royal Society of London B**, v. 289, n. 1036, p. 321-331, 1980.

PG175

Water monolayer adsorbed on gypsum at room temperature

SANTOS, J. C. C.¹; MIRANDA, P. B.¹

jaciaraacassia@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Water is probably the most important adsorbate layer on surfaces. The properties of water adsorbed on solid surfaces are crucial in biology and material science. (1) It is surprising that the structure of this contact layers is still a matter of argument. It happens because our atomic level understanding of H₂O adsorption remains unclear and basic questions on the bonding pattern on various surfaces remain unanswered. Although adsorbed water has been the subject of extensive studies for a long time only recently techniques have the selectivity and sensitivity to study this interfaces to the last surfaces atomic layers. (2) The techniques that provide such approach are sum-frequency generation (SFG), scanning polarization force microscopy (SPFM) and others microscopic techniques. Studies of the structure of water films formed at gypsum monocrystal, at room temperature, in equilibrium with water vapor at various relative humidities are been carried using the surface-selective vibrational technique sum-frequency generation (SFG) spectroscopy. The gypsum singlecrystal is a layered crystal with molecular planes linked through weak hydrogen bonding, allowing the perfect cleavage of (010) faces. Therefore, the samples can be cleaved before measurements obtaining a fresh clean surface free form atmospheric contaminants. The SFG spectra of gypsum singlecrystal in N₂ atmosphere showed anisotropic arrangement of H₂O molecules along the cleavage plane. This allows us to choose the best crystal orientation to perform the SFG studies, since to study water films adsorbed on surfaces we need to discriminate the different contributions from structural water and from the adsorbed water. SFG spectra while exposing the gypsum surface to atmospheres with various relative humidities will be performed shortly. Among other thing these results will be relevant to understand the role of adsorbed water on the high mechanical strength of pressed gypsum blocks.

Keywords: Nonlinear optics. Sum-frequency generation. Water adsorption.

Referências:

- 1 VERDAGUER, A.; SACHA, G.; M. BLUHM, H.; SALMERON, M. Molecular structure of water at interfaces: wetting at the nanometer scale. **Chemical Reviews**, v.106, n.4, p.1478-1510, 2006.
- 2 MIRANDA, P. B.; XU, L. S.; Y. R. SALMERON, M. Icelike water monolayer adsorbed on mica at room temperature. **Physical Review Letters**, v.81, n. 26, p. 5876-5879, 1998.

PG176

Abordagem de sistema quântico aberto para biologia quântica

SANTOS, M. L.¹; PINTO, D. O. S.¹

millenalogrado@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na tentativa de estudar uma situação física menos idealizada, não é possível ignorar completamente a influência que o sistema estudado sofre do meio. Portanto, o estudo de sistemas quânticos abertos é de essencial importância, sendo alvo de estudo em áreas como mecânica quântica estatística, ótica, cosmologia, entre outros. No presente estudo será analisado, através de um sistema quântico aberto, (1) o efeito de magnetocepção de um pássaro (European Robin), ou seja, o senso de direção que a ave possui por meio do campo magnético terrestre. Esse efeito, chamado de par radical, ocorre na retina do pássaro através de um processo molecular e é responsável por essa orientação espacial dos animais. Nesse mecanismo dois spins eletrônicos interagem com o campo terrestre e com o spin nuclear (todos em uma mesma molécula). Esse par eletrônico pode se recombinar em um estado singleto ou tripleto e cada um desses estados geram diferentes sinais neurais que auxiliam o pássaro em sua localização. (2) Para estudar um sistema como esse, partimos inicialmente de um hamiltoniano geral o suficiente para descrever elementos que compõe o sistema físico. A partir disto passamos a tratar como ambiente o núcleo da molécula, que interage por uma interação hiperfina com um dos elétrons, e o sistema de interesse como o par eletrônico, que sofre a ação do campo magnético terrestre. Iremos avaliar a dinâmica do par de elétrons através do operador densidade do sistema e de sua equação mestra. Com isso analisaremos a troca de informação entre o sistema de interesse e o ambiente a fim de averiguar se a mesma é Markoviana ou não. (3) Neste último caso a informação perdida para o ambiente pode retornar para o sistema de interesse demonstrando uma maior eficiência do processo biológico.

Palavras-chave: Sistema quântico aberto. Sistema não-markoviano. European Robin.

Referências:

1 TIERSCH, M., BRIEGEL, H, J. Decoherence in the chemical compass: the role of decoherence for avian magnetoreception. **Philosophical Transactions Royal Society A**, v. 370, 4517-4540, 2012. doi: 10.1098/rsta.2011.0488.

2 GAUGER, E. M.; RIEPER, E.; MORTON, J. J. L.; BENJAMIN, S. C.; VEDRAL, V. Sustained quantum coherence and entanglement in the avian compass. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 4, p. 040503, 2011.

3 RIVAS, A.; HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. **Quantum non-markovianity**: characterization, quantification and detection. 2014. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1405.0303v1.pdf>>. Acesso em: 22 ago. 2014.

PG177

Predição de complexos multiméricos através de análise de acoplamento direto e modelagem baseada em estrutura

SANTOS, R. N.¹; MORCOS, F.²; JANA, B.²; ONUCHIC, J. N.²; ANDRICOPULO, A. D.¹

rnsantos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Rice University

A Modelagem Baseada em Estrutura (SBM, do inglês *Structure-Based Modeling*) é um método computacional de bastante sucesso para permite estudar mudanças estruturais relacionadas à conformação e função biológica de proteínas, através de simulações computacionais. (1) Este método define um potencial de energia que considera as interações de uma estrutura específica como parâmetros para direcionar forças moleculares em um processo de dinâmica molecular. A Análise de Acoplamento Direto (DCA, do inglês *Direct-Coupling Analysis*) é um método computacional de co-variância que permite prever contatos entre resíduos proteicos utilizando apenas sequências de aminoácidos de uma proteínas-alvo. (2) Ele baseia-se na hipótese de que mutações em resíduos essenciais para a função e estrutura de uma proteína devem ser compensadas por mutações em outros resíduos correlacionados, a fim de preservar sua funcionalidade. Uma metodologia computacional bastante eficiente para auxiliar a compreensão dos mecanismos por trás da função de proteínas é a integração de SBM e DCA. Estes métodos permitem identificar diferentes estados conformacionais que ocorrem ao longo da função da proteína, mas que não são observados por métodos de cristalografia. Neste trabalho apresentamos a utilização de DCA e SBM para prever a associação de proteínas em complexos homodiméricos. A identificação destes complexos pode elucidar mecanismos moleculares envolvidos na função de proteínas e também auxiliar no desenvolvimento de novos fármacos capazes de modular a formação e o funcionamento destas proteínas.

Palavras-chave: DCA. Dinâmica molecular. Dímeros.

Referências:

1 NOEL, J. K.; WHITFORD, P. C.; SANBOMNMATSU, K. Y.; ONUCHIC, J. N. SMOG@ctbp: simplified deployment of structure-based models in GROMACS. **Nucleic Acid Research**, v. 38, p. 657-661, 2010. doi: 10.1093/nar/gkq498.

2 MORCOS, F.; PAGNANI, A.; LUNT, B.; BERTOLINO, A.; MARKS, D. S.; SANDER, C.; ZECCHINA, R.; ONUCHIC, J. N.; HWAA, T.; WEIGT, M. Direct-coupling analysis of residue coevolution captures native contacts across many protein families. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 108, n. 49, p. 1293-1301, 2011.

PG178

Characterization of components of the biosynthesis and insertion pathways of selenocysteine in *Naegleria gruberi*: Selenophosphate synthetase and tRNA^{Sec}

SANTOS, T. M.¹; THIEMANN, O. H.¹

tms1991@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The twenty-first amino acid, selenocysteine (Sec), represents the main available organic form of selenium, an essential micronutrient, and has distinct synthesis pathways for bacteria, archaea and eukaryotes, (1) justifying studies evaluating its particular evolutionary consequence and potential practical use. *Naegleria gruberi*, the organism studied in this project, as a basal eukaryote presents itself as quite an interesting target for understanding the process of synthesis and incorporation of the amino acid in the eukaryotic domain of life. Recently, the presence of the biosynthesis and incorporation pathways of selenocysteine have been identified in *N. gruberi* (2) and among the identified genes there is a Selenophosphate synthetase (SPS) with a central role in the pathway, involved in the catalysis of the conversion of selenide and adenosine 5'-triphosphate (ATP) in selenophosphate, organic form of selenium. The *N. gruberi*'s SPS contains two distinct domains: the C-terminal domain, which has high sequence identity with bacterial SPSs and the N-terminal domain, similar to prokaryotic methyltransferases. Furthermore, it was identified a gene in the protozoan analogous to the SelC prokaryotic gene, responsible for the expression of tRNA^{Sec}. This specific transfer RNA promotes the insertion of selenocysteine into selenoproteins in the UGA codon, (3) which most often is interpreted as a stop codon in mRNA translation. In addition to this, experimental data indicate the existence of another tRNA translating the UGA codon, suggesting two possible hypotheses: it can be either an additional tRNA^{Sec} for incorporation of Sec, or a tRNA that carries another amino acid, hitherto unknown, with the ability to recognize the same codon. The present project intends to study one of the domains of the SPS enzyme, the one which has a high sequence identity with prokaryotic methyltransferases (SPS.MT), regarding their atomic structure and physiological role in the body in addition to performing experiments allowing the elucidation of the role of the second tRNA that pairs up with the UGA codon. For the SPS.MT domain, immunochemical assays and biophysical characterizations will be performed, in addition to tracking the structural aspects through crystallographic studies. For the tRNA, molecular biology techniques and biochemical assays that allow investigating their function and defining its involvement in the translation of selenoproteins process will be applied. Together, these experiments may contribute to the understanding of the biosynthesis of selenocysteine in basal eukaryotes and may provide some insights into how the process develops in higher eukaryotes as well.

Palavras-chave: *Naegleria gruberi*. Selenocysteine. tRNA^{Sec}.

Referências:

1 STADTMAN, T. C. Selenocysteine. **Annual Review of Biochemistry**, v. 65, p. 83-100, 1996. DOI:

10.1146/annurev.bi.65.070196.000503.

2 DA SILVA, M.T.; CALDAS, V. E.; COSTA, F. C.; SILVESTRE, D. A.; THIEMANN, O. H. Selenocysteine biosynthesis and insertion machinery in *Naegleria gruberi*. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v.188, n. 2, p. 87-90, 2013.

3 BOCK, A.; STADTMAN, T. C. Selenocysteine, a highly specific component of certain enzyme, is incorporated by a UGA-directed co-translation mechanism. **Biofactors**, v. 1, n. 3, p. 245-250,1988.

PG179

Análise de assimetria e irregularidade de borda de lesões melanocíticas

TRAVIESO, G.¹; FONTOURA DA COSTA, L.¹; KURACHI, C.¹; BAGNATO, V. S.¹; SALVIO, G.²; SBRISSA, D.¹

sbrissa@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Hospital do Câncer de Jaú

Melanoma Maligno é o mais perigoso tipo de câncer de pele, atingindo letalmente milhares de pessoas ao redor de mundo. Apesar do seu alto grau de letalidade, sua cura é perfeitamente possível se o tratamento do carcinoma for realizado nos estágios iniciais. Nas últimas décadas, técnicas de processamento e análise de imagens tem auxiliado médicos na identificação do melanoma maligno em estágios iniciais. Em geral, sistemas de detecção de melanoma baseiam-se na regra do ABCD. A regra do ABCD (1) é um mnemônico para as principais características presentes no melanoma maligno, nas quais referem-se **A** para Assimetria da lesão, **B** para Borda Irregular, **C** para Coloração diferenciada e **D** para Diâmetro maior que 6 mm. O presente trabalho propõe um sistema de processamento de imagens clínicas — obtidas de câmeras digitais comuns —, analisando a assimetria e a irregularidade de borda como fator de discriminação entre melanoma maligno e outros tipos comuns de lesões melanocíticas. Inicialmente foram coletadas 143 imagens de lesões, das quais haviam 69 melanomas malignos, 43 nevos displásicos e 31 nevos atípicos. Foram extraídas métricas referentes à: características de forma; momentos centrais (*Hu Moments*); assimetria; curvatura e dimensão fractal (2). *Linear Discriminant Analysis* foi realizada para a redução de dimensionalidade dos dados e para obter a máxima dispersão entre as classes estudadas (3). A validação dos resultados foi feita através da construção da matriz de confusão para as três classes. Os principais resultados obtidos da classificação reportam uma boa discriminação do melanoma das demais classes, com uma média de 70% de acerto na validação cruzada. Esse resultado sugere que, de fato, o melanoma maligno possui assimetria e irregularidade de borda mais acentuada dos que os demais nevos analisados. Cabe agora, julgar qual a contribuição que esse resultado pode oferecer na triagem clínica de lesões melanocíticas duvidosas. Para tal, foi proposto um teste à médicos especialistas e não-especialistas, onde deviam julgar, com base em sua experiência, em **positivo** e **negativo** para melanoma. O teste era composto de 20 imagens. Os resultados da aplicação do teste revelou uma média de acertos de 50% e 61% para não-especialistas e especialistas, respectivamente. Já nosso sistema obteve 70% de acertos. É necessário citar que os doutores não tinham acesso às lesões *in situ*, o que certamente aumentaria seu percentual de acerto. De qualquer maneira, esse resultado permite concluir que o sistema proposto é capaz de auxiliar médicos não especialistas, ou mesmo o público em geral, na análise de lesões melanocíticas de caráter duvidoso. Além disso, o presente sistema pode colaborar com outros sistemas baseados em análise de coloração e textura de lesões, aumentando a robustez do diagnóstico, além de haver também a possibilidade de implementar o sistema para acesso remoto, atingindo regiões afastadas de baixo poder aquisitivo com um sistema de identificação de melanoma.

Palavras-chave: Melanoma. Diagnóstico precoce. Processamento de imagens.

Referências:

1 FRIEDMAN, R. J.; RIGEL, D. S.; KOPF, A. W. . Early detection of malignant melanoma :the role of physician examination and self examination of the skin. **CA: cancer journal for clinicians**, v. 35, n. 3, p. 130-151, 1985. .

2 FONTOURA DA COSTA, L; CESAR JR, R. M. . **Shape analysis and classification:** theory and practice. New York: CRC press, 2000. .

3 DUDA, R. O.; HART, P. E.; STORK, D. G. . **Pattern classification..** New York: John Wiley & Sons, 2012.

PG180

Superadiabaticidade em RMN

SEGURA, C. O.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹

charlieoncebay@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um problema importante em Mecânica Quântica (MQ) está relacionado a evolução adiabática de um estado quântico. Nessa situação, não existe transição entre diferentes níveis de energia, implicando numa interpretação geométrica da MQ através da fase de Berry. (1) Em algumas circunstâncias mesmo quando o sistema original não respeita as condições que levam a evolução adiabática, ao modificarmos os autoestados do hamiltoniano do sistema, podemos chegar a situação onde a adiabaticidade passa a ser respeitada, isto é o critério superadiabático. (2) Outra forma de tratar esse problema é através de uma engenharia de hamiltonianos, onde se constrói um termo chamado de contradiabático, que somado ao hamiltoniano inicial faz que respeite tais condições. (3) Essas duas abordagens estão conectadas e é possível mostrar que uma leva a outra. Nesse trabalho, estudaremos o problema da adiabaticidade no contexto de RMN. Mostraremos como o critério adiabático surge e a engenharia de hamiltoniano que se pode fazer em tal sistema físico.

Palavras-chave: RMN. Adiabaticidade. Sistemas abertos.

Referências:

1 BERRY, M. V. Transitionless quantum driving. **Journal of Physics A**, v. 42, n. 36, p. 3653 03-1-365303-9, 2009.

2 DESCHAMPS, M. ; KERVERN, G.; MASSIOT, D.; PINTACUDA, G.; EMSLEY, L.; GRANDINETTI, P. J. Superadiabaticity in magnetic resonance. **Journal of Chemical Physics**, v. 129, n. 20, p. 204110-1-204110-10, 2008.

3 IBAÑEZ, S.; CHEN, X.; MUGA, J. G. **Shortcuts to adiabaticity by superadiabatic iterations**. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1212.6335.pdf>>. Acesso em: 27 dez. 2012.

PG181

Avaliação da terapia fotodinâmica em cultivo celular tridimensional por levitação magnética

SEKIMOTO, L. S. A.¹; KURACHI, C.¹

larissasekimoto@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica surgiu como uma modalidade terapêutica promissora para neoplasias e outras doenças de pele. Ela é baseada no acúmulo seletivo de um fotossensibilizador no tecido tumoral seguido por iluminação com fonte de luz de comprimento de onda adequado. A luz excita as moléculas fotossensibilizadoras que, para retornar ao estado fundamental, liberam energia. Essa energia é captada por moléculas de oxigênio que são capazes de sintetizar espécies reativas de oxigênio, as quais levam à morte do tecido tumoral. (1) Sabe-se que a cultura celular convencional em monocamada tem sido uma ferramenta essencial para a biologia moderna, uma vez que permite estudar o comportamento das células fora do organismo, em ambiente controlado, porém, ela recria inadequadamente o ambiente natural no qual as células residem. Essa limitação tem levado a pesquisas em cultivo celular tridimensional *in vitro*, como através do método de levitação magnética (MLM). No MLM, nanopartículas magnéticas estão ligadas a células em cultura de monocamada para torna-las magnéticas. (2) Quando suspensas em meio de cultura, é possível usar um campo magnético externo, assim as células levitam na interface ar-líquido, formando matriz extracelular e agregando-se para gerar cultura tridimensional. (3) Nesse estudo será avaliado a eficácia da Terapia Fotodinâmica em câncer de pele humano (linhagem celular G361), através do cultivo celular tridimensional por levitação magnética. Análises indicaram que a cultura 3D de células de melanoma humano permaneceu viável até aproximadamente sete dias, perdendo sua estrutura morfológica após esse tempo. Além disso estudo preliminares de incorporação do fotossensibilizador Photogem, demonstraram que o tempo necessário de incubação da cultura com o fotossensibilizador para difusão do mesmo nas células foi de 16h. A difusão do fotossensibilizador na cultura 3D foi monitorada por microscopia confocal, permitindo avaliar o tempo de incubação adequado para posterior aplicação da Terapia Fotodinâmica.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Cultivo tridimensional. Levitação magnética.

Referências:

1 BECKER, J. L.; SOUZA, G. R. Using space-based investigations to inform cancer research on earth. **Nature Reviews Cancer**, v. 13, n. 5, p. 315-327, 2013.

2 HAISLER, W. L.; TIMM, D. M.; GAGE, J. A.; TSENG, H.; KILLIAN, T. C.; SOUZA, G. R. Three-dimensional cell culturing by magnetic levitation. **Nature Protocols**, v. 8, n. 10, p.1940-1949, 2013.

3 TSENG, H. et al. A three-dimensional co-culture model of the aortic valve using magnetic levitation.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

Acta Biomaterialia, v. 10, n. 1, p.173-182, 2014.

PG182

Caracterização das interações macromoleculares das proteínas envolvidas na síntese de selenocisteínas em *Escherichia coli*

SERRAO, V. H. B.¹; PORTUGAL, R. V.²; HEEL, M. van³; THIEMANN, O. H.⁴

vitor.serrao@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²LNNano - CNPEM

³Leiden Universiteit

⁴Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de processos de tradução do código genético em proteínas desperta o interesse pelo seu papel central no metabolismo celular, em particular, o estudo da via de síntese de novos aminoácidos, como a selenocisteína e a pirrolisina, que resultam na expansão do código genético dos 20 aminoácidos tradicionais para um total de 22 aminoácidos. A selenocisteína (Sec, U) representa a principal forma biológica do elemento selênio e sua incorporação é um processo co-traducional em selenoproteínas como resposta ao códon UGA em fase e requer uma complexa maquinaria molecular. O repertório completo de genes envolvidos na via de síntese desse aminoácido em procariotos é conhecido, porém as interações moleculares entre as diferentes proteínas não é bem caracterizada.(1-2) Este projeto visa à caracterização molecular e estrutural das interações entre a Selenocisteína Sintase (SelA) e Fator de Elongação específico para selenocisteínas (SelB) com Ribossomo de *Escherichia coli* além de analisar a influência da presença do elemento de estrutura secundária do RNA mensageiro conhecido como elemento SecIS (Selenocysteine Incorporation Sequence) e do tRNA específico, SelC. (3) Para isso, medidas de Espectroscopia de Anisotropia de Fluorescência (FAS) e Técnicas de Microcalorimetria como calorimetria de titulação isotérmica (ITC) e calorimetria de varredura diferencial (DSC) são utilizadas para determinação das constantes de interação desses complexos proteicos e atividade GTPase de SelB. A fim de obter modelos estruturais, serão empregadas técnicas de Microscopia Eletrônica utilizando coloração negativa (Negative Stain) e Crio-Microscopia Eletrônica de alta resolução (Cryo-ME) além de Espectrometria de Massa com Troca Hidrogênio/Deutério (H/DEx). No atual momento do projeto, as proteínas envolvidas foram expressas e as interações passaram a ser caracterizadas em solução e, a partir das determinações das condições de interação e montagem dos complexos, os estudos estruturais passarão a serem realizados. Os resultados dos estudos propostos neste projeto irão auxiliar no entendimento do mecanismo de incorporação deste aminoácido em bactérias bem como nos demais domínios da vida.

Palavras-chave: Selenocisteínas. Complexos macromoleculares. Crio microscopia eletrônica.

Referências:

1 THANBICHLER, M.; BÖCK, A. Purification and characterization of hexahistidine-tagged elongation

factor SelB. **Protein Expression and Purification**, v 31, p. 265-270, 2003.

2 FORCHHAMMER, K.; BÖCK, A. Selenocysteine synthase from *Escherichia coli*. analysis of the reaction sequence. **Journal of Biological Chemistry**, v. 266, n.10, p. 6324-6328, 1991..

3 MANZINE, L. R. *et al.* Assembly stichiometry of bacterial selenocysteine synthase and tRNA^{sec} of *Escherichia coli*. **FEBS Letters**,v.587, n.7, p.906-911,2013. doi: 10.1016/j.febslet.2013.

PG183

Lattice QCD and heavy-quark physics

SERRONE, W. M.¹; MENDES, T.¹

willian.matioli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Quantum Chromodynamics (QCD) is the gauge theory that describes the strong interaction in hadrons using a model of elementary particles (quarks) with color charge and interacting through the exchange of gauge fields (gluons), also color-charged. Its most striking feature is that its coupling constant is negligible in the small-distance limit - i.e. the limit of high energy and momentum, a behavior known as asymptotic freedom - and strong at large distances - i.e. low energy and momentum, which leads to the confinement of quarks. (1) Therefore, we are not allowed to apply perturbation theory when considering low-energy problems, such as quark confinement and the study of hadron spectrum, as opposed to Quantum Electrodynamics (QED), for which perturbation theory is widely applied in all regimes. The nonperturbative treatment of QCD consists of performing a Wick rotation to the Euclidean space and introducing a discretization in the form of a lattice. The lattice will introduce an ultraviolet regularization at the cost of losing some symmetries (which are recovered in the continuum limit, i.e. in the limit of zero lattice spacing). This approach makes the theory mathematically similar to statistical mechanical models, enabling us to borrow methods from that field. In particular, it allows us to perform Monte Carlo simulations of the theory for *ab initio* studies. (1) This kind of simulation is computationally intensive, being the use of parallel computing common. However, when one has to deal with hadrons containing heavy quarks, Effective Field Theories (EFTs) can be used, which reduces the computational cost and may allow analytic calculations. Among the heavy quark systems, the ones containing the bottom quark (b quark) are of great interest. B mesons originate processes with high CP-symmetry violation and are extensively studied in the search of physics beyond the Standard Model. (2) These systems are composed of a b quark and a light quark. Their description using a full lattice QCD simulation is particularly challenging due to the large lattice with small spacing required. The most popular EFT is the Heavy-Quark Effective Theory (HQET), which can be used to make the connection between the small length scale of light quarks and the large scales of the heavy quark. (3)

Keywords: Lattice QCD. Heavy-quark effective theory (HQET). Heavy quarks.

Referências:

1 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice**: an introductory presentation. Berlin, Heidelberg: Springer, 2010. 343 p.

2 GROSSMAN, Y.; WORAHA, M. P. CP asymmetries in B decays with new physics in decay amplitudes. **Physics Letters B**, v. 395, n. 3-4, p. 241, 1997.

3 WINGATE, M. B physics on the lattice: present and future. **Modern Physics Letters A**, v. 21, n.



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

15, p. 1167, 2006.

PG184

Protótipo dataflow implementado em FPGA

SILVA JUNIOR, J. T.¹; MATIAS, P.¹; RUGGIERO, C. A.¹

jtsjunior@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a década de 70 existe um grande interesse acerca do ganho em desempenho de processamento computacional, de forma que ele não pode ser obtido somente com o aumento do *clock* do processador, como tem acontecido nas últimas décadas. O paralelismo é um paradigma muito explorado para esse fim. Diversos sistemas computacionais controlados por dados (*data-driven*) foram analisados a fim de obter esse paralelismo em nível de organização e arquitetura de computadores. Apenas citando como exemplo para aplicação de nossa proposta, a **Intel** possui um processador comercial em sua grade de produtos, que possui 50 núcleos físicos em um único chip (**Xeon Phi**, arquitetura **MIC**), talvez uma arquitetura **MIMD** (*Multiple Instructions, Multiple Data*) possa ser uma alternativa mais viável para o controle dessa grande quantidade de processadores, ao invés de deixar a cargo do sistema operacional controlá-los, como vem sendo feito na arquitetura **Von Neumann** ainda utilizada nos dias atuais, para controle do paralelismo. O **Dataflow** é uma técnica para sistemas computacionais controlado por dados, para especificar programas no formato de um grafo bidimensional: Instruções que podem ser executadas paralelamente são dispostas lado-a-lado e instruções que devem ser executadas sequencialmente são dispostas uma abaixo da outra. (1) O objetivo desse trabalho é a criação de um protótipo que siga as diretrizes do protótipo **Dataflow** de Manchester com a utilização de **FPGA** (dispositivo para reconfiguração de hardware a partir do rearranjo de portas lógicas). O Protótipo **Dataflow** de Manchester é baseado em um sistema dataflow dinâmico, ou seja, o rótulo de cada ficha (conjunto que armazena todas as informações de um determinado dado) possui um nome de ativação único.(2) Essa característica permite a realização de laços e recursividade. Esse protótipo é caracterizado por sua grande modularidade sendo composto por 5 módulos principais, sendo eles: Fila de Fichas (unidade de *buffer*), Unidade de Emparelhamento (emparelhamento de fichas destinadas a mesma instrução), Unidade de Sobrecarga (alocação de fichas que aguardam emparelhamento), Unidade de Instruções (armazenamento do código do programa em execução) e Unidade de Processamento (armazena as unidades funcionais que compõem o sistema).(3) O presente projeto prevê a implementação desse protótipo particular em sua forma mais simplificada, com a finalidade de analisar seu desempenho e viabilidade a partir de dispositivos modernos. Foram desenvolvidas 4 das 5 unidades mencionadas anteriormente, tendo sido removida a Unidade de Sobrecarga, que não se fez necessária para a execução de programas mais simples. Até o presente momento foi obtido um *speedup* não muito significativo, porém estimamos que o aumento da largura de banda entre os módulos (que vem sendo implementado atualmente) seja capaz de nos fornecer melhores resultados de *speedup*. É importante observar que mesmo não apresentando as características esperadas, o protótipo atual já apresenta desempenho equiparável aos processadores comerciais modernos. Todo o desenvolvimento vem sendo realizado com a utilização de **FPGA** através de linguagem **Bluespec System Verilog**.

Palavras-chave: Dataflow. Arquitetura de computadores. Paralelismo.

Referências:

- 1 GURD, J. R.; KIRKHAM, C. C.; WATSON, I. The Manchester prototype dataflow computer. **Communications of the ACM**, v. 28, n. 1, p. 34- 52, Jan. 1985.
- 2 SHARP, J. A. **Dataflow computing**: theory and practice. New York: Ablex Publishing Company, 1992.
- 3 KIRKHAM, C. C. **The Manchester prototype dataflow system**: basic programming. 6nd ed. Manchester: UMC-DF-BPM,1987. Manual.

PG185

Differential geometry approach for ensemble analyses

SILVA NETO, A. M. da¹; MONTALVÃO, R. W.¹

amarinho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The use of NMR-restrained Molecular Dynamics for determination of conformational ensembles of proteins allow the exploration of conformational changes on different time-scales and creates new opportunities for characterizing protein flexibility. Our main objective is use structural ensembles produced by NMR- restrained Molecular Dynamics for computing entropy contribution to changes in energy related to flexible protein- protein and protein-ligand docking. One of the challenges of such analyses is how to describe important protein motions and identify sub-population relevant for protein function understanding on those ensemble. Here we present an analyses of such ensembles using differential geometry descriptors. We use the ARABESQUE(1) method which consist of create the spline representation and calculate of torsion, curvature and arc-length for each ensemble conformation. Initially, we use a ensemble composed of calculated normal modes of DNA Binding Domain of HPV-18 E1 protein on two different states, the free and bound states, to investigate if those descriptors can identify such sub-populations on the ensemble. We also apply it to a Ubiquitin and RNase ensembles produced by Residual Dipolar Coupling Restrained Molecular Dynamics method developed by our group in collaboration with Michele Vendruscolo. Those descriptors clearly allow the identification of relevant motions and differentiate sub-population, such as the bound and free states, on the protein structure ensemble based on relevant motion. A differential geometry description has shown to be a good alternative for representation and analyses of such ensemble due to its simplicity, sensitivity, easy interpretation and low computational cost. The calculation of principal component analyses and a proper clustering method applied to such descriptors can allow automatic identification of important sub-population on protein conformational ensemble.

Palavras-chave: Conformational ensemble. Differential geometry. Protein flexibility.

Referências:

1 LEUNG, H. et al. ARABESQUE a tool for protein structural comparison using differential geometry and knot theory. **World Research Journal of Peptide and Protein**, v.1, n.1, p.33-40, 2012.

PG186

Novas estratégias para o diagnóstico de onicomicose e tratamento por terapia fotodinâmica

SILVA, A. P.¹; KURACHI, C.¹; BAGNATO, V. S.¹; INADA, N. M.¹

paulalsir@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A onicomicose é uma doença de alta incidência da lâmina ungueal, constituindo aproximadamente metade dos casos de infecção nas unhas. O tratamento vai além de cuidados estéticos, em portadores de diabetes, podem ocorrer infecções graves. (1) Convencionalmente os dermatologistas prescrevem antifúngicos e antibióticos por longos períodos. A alta incidência deste tipo de infecção e o aumento de micro-organismos resistentes às drogas disponíveis tornam importante o desenvolvimento de novas tecnologias e opções terapêuticas. (2) Neste contexto, apresentamos a terapia fotodinâmica (TFD) como alternativa de tratamento para onicomicose, técnica promissora que elimina os micro-organismos por ação das espécies reativas produzidas no local via um fotossensibilizador (FS) e luz em comprimento de onda específico. (3) O objetivo deste estudo é investigar novas estratégias para o diagnóstico e tratamento da onicomicose. Foram realizados estudos fotofísicos e ensaios *in vitro* com diferentes tipos de curcumina como FS; avaliamos mecanismos que auxiliam a penetração do FS na lâmina ungueal através da utilização de emolientes e novas formulações farmacêuticas. Para os ensaios *in vitro* comparamos a curcumina sintética e comercializada mundialmente (Sigma-Aldrich®) com outras três variações da empresa nacional PDTPharma® mediante estudos fotofísicos como: absorção, fluorescência e solubilidade. Em pacientes foram realizadas imagens com câmera no infra-vermelho e por fluorescência para auxiliar no diagnóstico. Testes de análise estrutural ungueal por microscopia eletrônica de varredura para avaliar o dano causado pelo emoliente (uréia 40%) utilizado para melhorar a penetração do fármaco veiculado tanto em gel, como em emulsão. Para os ensaios clínicos, foi utilizado um sistema LED (450 nm, 100 mW/cm²) desenvolvido pelo Grupo de Óptica, Instituto de Física de São Carlos, projetado anatomicamente para pés e mãos. A curcumina foi aplicada (1,5 mg/mL) em gel ou em emulsão. Após 30 minutos, foi iluminado durante 20 minutos. Após 7 dias, nova avaliação clínica foi efetuada e, quando necessário, uma repetição do procedimento. Para o entendimento dos princípios TFD, foram realizados ensaios *in vitro* de inativação dos principais micro-organismos causadores de onicomicoses como: *Candida albicans*, *Trichophyton mentagrophytes* e *T. rubrum*. Como fonte de irradiação foi utilizado um equipamento com LEDs que emitem em 450 nm e irradiância de 35 mW/cm². Os resultados mostraram que as curcuminas apresentaram estabilidade fotofísica e o melhor resultado alcançado com a inativação dos micro-organismos foi com a mistura de curcumina e curcuminoides (PDTPharma®). Esta formulação tem a vantagem do baixo custo, quando comparado com a da Sigma-Aldrich®. O emoliente com a emulsão, mostraram maior penetração do fármaco na lâmina ungueal. Os resultados obtidos do diagnóstico da onicomicose por infra-vermelho e por fluorescência foram satisfatórios indicando que estas técnicas podem diferenciar a lâmina ungueal sadia das lesionadas. Os resultados clínicos foram satisfatórios após média de 6 sessões de TFD, quando utilizado a curcumina emulsão e 10 sessões quando em gel. Estes resultados mostram a viabilidade do uso da TFD para o tratamento de onicomicose, com tecnologia nacional de baixo custo, aplicação *in situ*, evitando os efeitos adversos relatados pelo uso da

medicação convencional.

Palavras-chave: Onicomicose. Curcumina. LED.

Referências:

- 1 SMIJS, T.; DAME, Z.; HAAS, E., AANS, J.B.; PAVEL, S.; STERENBORG, H. Photodynamic and nails penetration enhancing effects of novel multifunctional photosensitizers designed for treatment the of the onychomycosis. **Photochemistry and Photobiology**, v. 90, p. 189-200, 2014. doi: 10.1111/php.12196.
- 2 LEDON, J.A.; SAVAS, J.; FRANCA, K.; CHACON, A.; NOURI, K. . Laser and light therapy for onychomycosis a systematic review. **Lasers in Medical Science**, v. 29, n. 2, p. 823-829, 2014.
- 3 SILVA, A. P., KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; INADA, N.M. Fast elimination of onychomycosis by hematoporphyrin derivative-photodynamic therapy. **Photodiagnosis Photodyn Therapy**, v. 10, n.3, p. 328-30, 2013.

PG187

O KBDM como ferramenta para o processamento de dados clínicos de espectroscopia por Ressonância Magnética: estudos preliminares

SILVA, D. M. D. D. da¹; LIMA, T. S.¹; PAIVA, F. F.¹

danielomendes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Muito embora o formalismo de Fourier tenha um retrospecto de sucesso no processamento de sinais, existem situações nas quais a análise espectral utilizando esse ferramental se torna bastante complicado. Para suprir essa demanda, alguns algoritmos alternativos foram propostos nos últimos anos e, em particular, o KBDM (Krylov Basis Diagonalization Method) tem demonstrado seu potencial, inclusive na área de RM (Ressonância Magnética). (1) Esse assunto vem sendo abordado por alguns pesquisadores do nosso grupo e, entre outras coisas, estamos trabalhando na avaliação e validação do método com a perspectiva de se obter uma ferramenta alternativa para processamento e análise de espectros clínicos obtidos por RM além de buscar soluções para problemas inerentes das aquisições para mapeamento de variações metabólicas como resposta a atividade cerebral. Além disso, nossos resultados indicam que o método pode ser uma alternativa promissora para resolver componentes com alto grau de superposição. (2) Desta forma, o presente projeto propõe avaliar a aplicabilidade do KBDM para o processamento de dados clínicos de espectroscopia por RM com foco em problemas cujos sinais apresentem alto grau de superposição. Este problema encontra uma série de aplicações na área clínica e os métodos tradicionais ainda deixam a desejar no que se refere à adequada quantificação de picos nessa condição. Em linhas gerais, o maior trabalho computacional envolvido no KBDM consiste na solução de uma equação de autovalores generalizada. A decomposição de uma das matrizes envolvidas no método em duas matrizes unitárias e uma matriz diagonal, formada pelos denominados "valores singulares", utilizando o método SVD (Single Value Decomposition) permite que o problema seja convertido em um problema de autovalores simples. (3) Além disso, a remoção dos elementos das matrizes relacionados aos valores singulares nulos permite a redução da dimensionalidade do problema, de modo a reduzir a demanda computacional do KBDM. Até o presente momento, a implementação do método foi realizada em linguagem Python utilizando as bibliotecas Numpy e Scipy, que fornecem operações e modelos eficientes para cálculos numéricos e processamento de sinais. Além disso, alguns testes envolvendo dados simulados foram realizados para validação da implementação. Os resultados mostram que o algoritmo consegue obter os parâmetros que compõem cada componente do sinal, ou seja, é possível obter os valores de amplitude, fase, tempo de relaxação e frequência de cada uma delas. Após a inserção de ruído gaussiano, novas componentes são detectadas, ou seja, o número de valores singulares não nulos diminui, conforme o esperado. Entretanto, foram observadas distorções nos parâmetros das componentes não relacionadas ao ruído. A análise deste comportamento é o próximo objeto de estudo deste trabalho, para que se possa lidar com quantificação de sinais clínicos de maneira adequada.

Palavras-chave: RM. KBDM. Espectroscopia.

Referências:

1 MANDELSHTAM, V. A. . The filter diagonalization method for data processing in NMR experiments. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v.38, p.159-196, 2001.PII: S0079-6565(00)00032-7.

2 SILVA, C. M. P. da . **KBDM como ferramenta para processamento de sinais de Espectroscopia por Ressonância Magnética**. 2013. 161p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013. Disponível em: <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76132/tde-12022014-075510/>>. Acesso em: 17 jun. 2014.

3 MAGON, C. J. **A inversão harmônica do espectro de ressonância magnética: uma solução para o problema dos autocampos**. 2011. Tese (Livre Docência em Ressonância Magnética Nuclear) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007. Disponível em: <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/livredocencia/76/tde-18102011-114700/>>. Acesso em: 17 jun. 2014.

PG188

Estudos sobre domínios sensores extracelulares CHASE nas vias do c-di-GMP

SILVA, E. E. D.¹; NAVARRO, M. V. A. S.¹

everton.edesio@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O di-GMP cíclico (c-di-GMP) altera em bactérias o comportamento de proteínas e RNAs. Dessa maneira ele regula virulência, ciclo celular e estruturas relacionadas a forma colonial e séssil, ou biofilme. (1) Em particular biofilmes causam vários prejuízos na medicina (ex.: infecções resistentes em implantes e órgãos, como em superfícies dentais) e na indústria (ex.: contaminação e deterioramento de tubulações e tanques; contaminação de produtos agrícolas). Somando isso as aplicações recentes de biofilmes em sistemas de tratamentos de água e solos (biorremediação) se justifica a importância dos avanços no conhecimento sobre os mecanismos de regulação do c-di-GMP. (2) Proteínas que produzem e degradam o c-di-GMP geralmente se apresentam sob forma de complexos de domínios proteicos. Poucos exemplos mostram como esses domínios regulam os domínios catalíticos do c-di-GMP e outros nem mesmo foram descritos, o que é o caso dos domínios CHASE. Os CHASE consistem em um subgrupo de sensores extracelulares delimitados por porções transmembrana e com poucos dados limitados ainda aos associados com histidino quinases. (3) O presente trabalho busca descrever a relação dos domínios CHASE com as rotas do c-di-GMP. Para isso tomou-se como modelo proteínas do fitopatógeno *Xanthomonas axonopodis* e do agente infeccioso *Pseudomonas aeruginosa*, versátil em hospedeiros e ambientes. As proteínas de *X. axonopodis* codificadas pelos genes XAC1345 e XAC1488 possuem domínios CHASE3 enquanto as de *P. aeruginosa* codificadas pelos genes PA14_53310 e PA14_37690 possuem o CHASE4. Através de técnicas em biologia molecular se pretende obter as proteínas e respectivas diferentes porções *in vitro* para experimentos. Ferramentas de bioinformática serão utilizados para auxiliar nas comparações com alguns sensores clássicos e na predição propriedades das proteínas. Serão empregados técnicas de cromatografia em diversos aspectos: para purificação, análise de estados oligoméricos, produtos enzimáticos das proteínas e outros. Ensaios de cristalografia estão inclusas na investigação de como o sensor transmite o sinal para porção intracelular e como o domínio catalítico altera entre estados funcionais. Até o momento tanto as proteínas inteiras e as construções foram clonadas em vetores de expressão pET29 e pETSUMO respectivamente. Testes de expressão e solubilidade já foram realizados para algumas delas. A proteína de *P. aeruginosa* codificada pelo gene PA14_53310, abreviada como PA53, foi tomada para otimização de experimentos. A purificação da proteína inteira PA53 foi positiva, mas ainda necessita ser otimizada. Construções dessa proteína tiveram ensaios de otimização de tampão executados e apresentaram atividade diguanilato ciclase. Ensaios oligoméricos de exclusão molecular e DLS conferem com dados presentes na literatura: as frações sensoras se apresentaram na forma dimérica enquanto a presença de domínios de dimerização nas frações citoplasmáticas interferem na atividade ciclase. Cristais do CHASE4 da PA53 foram obtidos mas precisam ser melhorados. O conhecimento obtido no trabalho pode fundamentar técnicas para enganar o sistema sinalizador bacteriano para que trabalhe a favor do homem. O entendimento do mecanismo de ativação das proteínas expandirá a compreensão sobre diguanilato ciclases e fosfodiesterases. Informações estruturais acerca dos sensores contribuirá no

entendimento destes, encontrados em diferentes reinos com baixas similaridades sequenciais mas que compartilham enovelamentos semelhantes.

Palavras-chave: C-di-GMP. Sensor. Biofilme.

Referências:

- 1 RÖMLING, U.; GALPERIN, M. Y.; GOMELSKY, M. Cyclic di-gmp: the first 25 years of a universal bacterial second messenger. **Microbiology and Molecular Biology Reviews**, v. 77, n. 1, p. 1-52, 2013.
- 2 ZHULIN, I. B.; NIKOLSKAYA, A. N.; GALPERIN, M. Y. Common extracellular sensory domains in transmembrane receptors for diverse signal transduction pathways in bacteria and archaea. **Journal of Bacteriology**, v. 185, n. 1, p. 285-294, 2003.
- 3 MONTANA STATE UNIVERSITY. Center for Biofilm Engineering. **How do biofilms impact our world?** Biofilm basics: section 3. Disponível em: <<http://www.biofilm.montana.edu/node/2409>>. Acesso em: 17 ago. 2014.

PG189

Estrutura multiescala de redes complexas

SILVA, F. N.¹; COSTA, L. da F.¹

filipinascimento@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O conceito de uma estrutura multiescala foi pouco desenvolvida no contexto de redes complexas. (1) Este trabalho tem como objetivo estudar e desenvolver técnicas para descrever a estrutura multiescala de redes e entender seu potencial para aplicação e compreensão de fenômenos desta natureza. Para isso, são desenvolvidas métricas baseadas na caracterização de redes em diferentes escalas (ou distâncias) de modo que revelem propriedades desta estrutura. Uma dessas propriedades é a dimensão multiescala, que tem grande importância em fenômenos físicos como na difusão e propagação de informação, além de estar diretamente relacionada aos graus de liberdade de um sistema. Outro conceito explorado é a caracterização do papel desempenhado por vértices dentro de comunidades. Para isso, definimos uma nova medida de pertinência de vértices baseada na entropia, que também está diretamente ligada aos graus de liberdade na rede. Quando aplicadas, as novas metodologias revelaram informações importantes sobre sistemas reais. Em especial, é introduzido o conceito de entropia temática, que é usada para quantificar a interdisciplinaridade de revistas científicas em termos da diversidade do modo como são citadas. Este estudo revelou-se condizentes com a percepção subjetiva que se tem sobre interdisciplinaridade. A dimensão multiescala também apresentou resultados interessantes na caracterização de redes de distribuição elétrica, assim como uma importante relação a dimensão e as bordas das redes. Também foram utilizadas e desenvolvidas técnicas e ferramentas para visualização de certos fenômenos e dinâmicas, assim como da própria estrutura das redes. Por último, a metodologia apresentada também permitiu inspecionar de maneira simples os níveis de detalhes intrínsecos de diferentes escalas em redes complexas. As diversas propriedades multiescala de redes permitiram avanços importantes em vários segmentos como: 1 - na quantificação de fenômenos subjetivos como na interdisciplinaridade, onde encontramos de forma quantitativa que Nature e Science não só são as revistas mais interdisciplinares, como também apresentam mesmos padrões de citação; (2) 2 - na análise de redes de genoma humano, que revelaram potenciais padrões de expressão gênica em pacientes diferentes tipos de epilepsia. (3) No geral, os desenvolvimentos presentes neste trabalho poderão ajudar a compreender melhor a relação entre dinâmicas de sistemas reais, que são, em geral fortemente multiescalares, e suas respectivas estruturas complexas.

Palavras-chave: Redes complexas. Estrutura multiescala. Dimensionalidade.

Referências:

- 1 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **Siam Review**, v. 45, n. 2, p. 167-256, 2003.
- 2 SILVA, F. N. et al. Quantifying the interdisciplinarity of scientific journals and fields. **Journal of**

Informetrics, v. 7, n. 2, p. 469-477, 2013.

3 BANDO, S. Y. et al. Complex network analysis of ca3 transcriptome reveals pathogenic and compensatory pathways in refractory temporal lobe epilepsy. **PLoS ONE**, v. 8, n. 11, p. e79913, 2013.

PG190

The quantum power of general quantum correlations and QUDIT systems

SILVA, I. A.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹; AZEVEDO, E. R.¹

isabela.almeida@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The quantum properties of physical systems can be exploited to enable advances in information and communication technologies. Entanglement certainly implies an important role in this context, but many important results were also obtained using separable states (noentangled), some of them based upon General Quantum Correlations (GQCs). The different formulations for the quantum discord, e.g. entropic discord, geometric discord and negativity of quantumness, have been recognized as excellent tools for quantifying GQCs as well as to follow their behavior under decoherence. In previously works we have shown how to implement the set of Bell diagonal quantum states (two qubits) based on two spins $1/2$ coupled by J scalar coupling and a spin $3/2$ quadrupolar nucleus as well as to monitor the behavior of the aforementioned GQCs quantifiers under decoherence using Nuclear Magnetic Resonance (NMR) techniques. With this, we experimentally investigated the influence of the initial state in the decoherence behavior, presenting the first experimental observation of freezing of geometric quantum discord (1) and a double sudden-change in the behavior of quantum discord when quantified by the negativity of quantumness. (2) Based on those results, we inquired about the universality of the observed behaviors over all GQCs quantifiers. Thus, in a new project, we are interested in experimentally observing the universality of the freezing phenomenon. Nowadays, we are also interested in the presence and behavior of GQCs in more general systems (with more than two qubits), which led us to investigate those GQCs in a three and four qubits system, where we can also observe freezing and sudden-change phenomena, respectively. Besides the power GQCs can provide, very recently it has been shown that even a single pure qudit, where any kind of correlation is present, is sufficient to design an oracle-based algorithm which solves a black-box problem faster than any classical approach of the same problem. To experimentally proof this idea, we performed the first experimental demonstration of the algorithm that determines whether eight permutation functions defined on a set of four elements is positive or negative cyclic. (3) While any classical solution to this problem requires two evaluations of the function, quantum mechanics allows us to perform the same task with only a single evaluation. The experiment was performed in a quadrupolar nuclear magnetic resonance setup using a single four-level quantum system, i.e., a ququart. In this case, we applied the Strong Modulated Pulse (SMP) technique, which allowed us to prepare initial states and apply quantum logical gates with high precision.

Keywords: Quantum correlations. Decoherence process. Nuclear magnetic resonance.

Referências:

1 SILVA, I. A.; GIROLAMI, D.; AUCCAISE, R.; SARTHOUR, R. S.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J.; AZEVEDO, E. R.; SOARES-PINTO, D. O.; ADESSO, G. Measuring bipartite quantum correlations

of an unknown state. **Physical Review Letters**, v. 110, n. 14, p. 140501-1-140501-6, 2013.

2 PAULA, F. M.; SILVA, I. A.; MONTEALEGRE, J. D.; SOUZA, A. M.; AZEVEDO, E. R.; SARTHOUR, R. S.; SAGUIA, A.; OLIVEIRA, I. S.; SOARES-PINTO, D. O.; ADESSO, G.; SARANDY, M. S. Observation of environment-induced double sudden transitions in geometric quantum correlations. **Physical Review Letters**, v. 111, n. 25, p. 250401-1-250401-5, 2013.

3 SILVA, I. A.; CAKMAK, B.; KARPAT, G.; VIDOTO, E. L. G.; SOARES-PINTO, D. O.; AZEVEDO, E. R.; FANCHINI, F. F.; GEDIK, Z. **Computational speed-up in a single qudit NMR quantum information processor**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1406.3579>>. Acesso em: 13 ago. 2014.

PG191

Electron paramagnetic resonance study of phosphate glasses doped with Fe(III) and Mn(II) ions

SILVA, I. D. A.¹; DONOSO, J. P.¹; MAGON, C. J.¹; NALIN, M.²; SIQUEIRA, R. F.²

idas.fisica@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de Araraquara - UNESP

Crystallization phenomena in glasses have been the subject of several academic and technological researches. (1) In this study we use electron paramagnetic resonance (EPR) to investigate the coordination symmetry of Fe(III) and Mn(II) ions doping phosphate based glasses. The experiments were performed at 50K in a spectrometer operating at X-Band (9.5 GHz). For the glass doped with Fe(III) ions, EPR measurements were made as a function of iron concentration and as a function of the thermal treatment. In both cases, the EPR spectra shows two resonance lines: the first one, at $g = 4.3$, is attributed to isolated Fe(III) ions in the glass matrix with tetrahedral or octahedral symmetry with rhombic distortions; the other one, at $g = 2.0$, is attributed to Fe(III) ions interacting by dipole-dipole coupling or superexchange coupling. This signal is assigned to the formation of aggregates (clusters) of Fe(III) ions in octahedral symmetry.(2). For the glass doped with Mn(II) ions, EPR spectra were measured as a function of Mn concentration. For the lowest concentration, the EPR spectra exhibits two resonance lines: one at $g = 4.3$ and the other at $g = 2.0$. The later presents six hyperfine lines due to the interaction between the electronic spin $S = 5/2$ and the nuclear spin of the 55 manganese nucleus ($I = 5/2$). This resonance is associated to Mn(II) ions in symmetries close to tetrahedral (3). The resonance at $g = 4.3$ can be attributed to Mn(II) ions in rhombic sites.(3) For the other samples, the spectra presents the same signals. The only difference is the loss of resolution of hyperfine lines in the $g = 2.0$ resonance and the decrease in intensity of the signal at $g = 4.3$. Financial support of Capes and Fapesp/CeRTEV (Center of Research, Technology, and Education in Vitreous Materials; FAPESP 2013/07796-6) are gratefully acknowledged.

Keywords: EPR. Iron. Manganese.

Referências:

- 1 NALIN, M. et al. Glasses in the SbPO₄ - WO₃ system. **Journal of Non-Crystalline Solids** v.353, n. 16-17, p.1592-1597, 2007.
- 2 BERGER, J. et al. Diluted and non-diluted ferric ions in borate glasses studied by electron paramagnetic resonance. **Journal of Non-Crystalline Solids** v.180, n.2-3, p.151-163, 1995.
- 3 FRANCO, R. W. A. et al. Magnetic resonance study of the crystallization behavior of InF₃-based glasses doped with Cu²⁺, Mn²⁺ and Gd³⁺. **Journal of Non-Crystalline Solids** v.352, n.32-35, p.3414-3422, 2006.

PG192

Investigation of the snRNPs Sm cores involved in *Trypanosoma brucei* SL trans splicing

SILVA, I. R.¹; SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹

ivan.usp@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Trypanosomes and related kinetoplastid flagellates are responsible for several serious diseases of humans and animals. *Trypanosoma brucei*, the agent of human sleeping sickness, has become a widely used eukaryotic model organism to the study of molecular biology processes. (1) The discovery of spliced leader (SL) trans splicing in *T. brucei* established a key difference between parasites and hosts. In contrast with the pre-mRNA cis splicing observed in their hosts, SL trans-splicing is responsible for resolving polycistronic mRNA precursors in individual mature-capped mRNAs, a process catalyzed by the spliceosome machinery. (2) Spliceosome is assembled by U1, U2, U4, U5 and U6 small nuclear ribonucleoproteins (snRNPs) that consist of structural RNAs (snRNAs), a common set of seven Sm proteins (B, D3, D2, D1, E, F, and G) and snRNPs specific proteins. (2) Surprisingly, the snRNP Sm core varies in *T. brucei*, in which SmB and SmD3 proteins are replaced by Sm16.5k and Sm15k, respectively, in U2 snRNPs and SmD3 protein is substituted by Ssm4 in U4 snRNPs. (3) In order to analyze the different *T. brucei* Sm cores, we employed homology modeling and molecular dynamics techniques. Additionally, we co-expressed the SmD3/SmB, SmE/SmF/SmG, SmD1/SmD2 and Sm16.5k/Sm15k sub-complexes using pEQ30 (Qiagen) expression vector in *E. coli* SG13009 strain. We also cloned the open reading frame for proteins Ssm4 and SmB into pETDuet-1 (Novagen) expression vector and co-expressed. Sub-complexes were co-purified by nickel affinity chromatography (HiTrap IMAC HP - Qiagen) followed by size exclusion chromatography in SUPEROSE 12 10/300 (GE). SnRNAs were produced by T7 RNA polymerase *in vitro* transcription using specific oligonucleotides. Circular Dichroism Spectroscopy was applied to monitor RNAs melting and refolding at varying temperature and Mg²⁺ ions concentration. Sm cores *in vitro* reconstitution in the presence and in the absence of snRNAs were analyzed by size exclusion chromatography, dynamic light scattering and small angle X-ray scattering. Our results are consistent with the *in vitro* formation of the three different Sm core complexes in the absence of snRNAs. Protein crystallization trials are also being applied but suitable crystals for X-rays diffraction were not obtained yet. Our results may provide new insights into the mechanism of SL trans splicing.

Keywords: SL trans splicing. snRNP. Sm core.

Referências:

- 1 KEELING, P. J. et al. The tree of eukaryotes. **Trends in Ecology and Evolution**, v. 20, n. 12, p. 670-676, 2005.
- 2 GUENZL, A. The pre-mRNA splicing machinery of trypanosomes: complex or simplified?. **Eukaryotic**

Cell, v. 9, n. 8, p. 1159-1170, 2010.

3 WANG, P. et al. Sm core variation in spliceosomal small nuclear ribonucleoproteins from *Trypanosoma brucei*. **EMBO Journal**, v. 25, n. 2, p. 4513-4523, 2006.

PG193

Engineering of the extraordinary optical transmission of metallic gratings via Er^{3+} doped tellurite glass

SILVA, O. B.¹; GARCIA RIVERA, V. A.¹; MAREGA JUNIOR, E.¹

otavio@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

We present a systematic analysis both theoretical and experimental of the optical properties of slit arrays in gold films that can be integrated on wide number of devices, especially in optical communications. Although the properties of extraordinary optical transmission (EOT) due surface plasmon polaritons (SPP), which are coupled in such nanostructures have been widely studied in the last two decades, (1) their influence on the absorption and transmission spectra from their dielectric substrates has not been deserved the same attention. The choice of a good substrate for implementation not just for metallic gratings, but also for other devices, it is extremely important in order to achieve great applications of the EOT in plasmonics. A good candidate to replace the conventional semiconductor based substrates it is the rare earth ion (REI) doped glass, which it is applicable in the light wave technologies, like optical waveguides and fiber optics due the signal amplification in these devices. (2) The specific case of Erbium ions and its implementation into glasses for the fabrication of fiber optics, as Erbium doped fiber amplifiers (EDFA) for instance, had shown an incredible success in order to replace optoelectronic devices. (3) With this motivation, we performed exhaustive experimental and theoretical investigations of geometric and dispersive properties of metallic slit arrays built on the Er^{3+} doped tellurite glass in the visible region and near infrared, which reveals the resonance features of these arrays, including the role of surface waves and their relationship with features in the transmission spectrum of the white light and this specific REI. The measured transmission it is elucidated considering the following effects: (i) white light absorption by the Er^{3+} ions, (ii) coupling between the light and the nanostructure via the creation of surface plasmon polariton where the wavelengths with minimum transmission correspond to the $4I_{15/2} \rightarrow [2H_{9/2}, 4F_{3/2}, 4F_{5/2}, 4F_{7/2}, 2H_{11/2}, 4S_{3/2}, 4F_{9/2}]$ absorption levels of the Er^{3+} , which propagates through the nanoholes, and finally, (iii) the Er^{3+} transmission intensity and the spectral shape symmetry depends on the nature of metallic film and the number of nanoholes constituting the arrays, for which the resonant properties are strongly affected. Furthermore, in order to compare the influence of substrate in the transmission properties, we also performed the same computational simulations on slit arrays fabricated on the BK7 glass.

Keywords: Metallic gratings. Rare earth ions. Extraordinary optical transmission.

Referências:

1 PORTO, J. A.; GARCÍA-VIDAL, F. J.; PENDRY, J. B. Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 14, p. 2845-2848, 1999.

2 JHA, A.; RICHARDS, B.; JOSE, G.; TEDDY-FERNANDEZ, T.; JOSHI, P.; JIANG, X.; LOUSTEAU,

J. Rare-earth ion doped TeO₂ and GeO₂ glasses as laser materials. **Progress in Materials Science**, v. 57, n.8, p. 1426-1491, 2012.

3 RAMACHARI, D.; RAMA MOORTHY, L.; JAYASANKAR, C.K. Gain properties and concentration quenching of Er³⁺ doped niobium oxyfluorosilicate glasses for photonic applications. **Optical Materials**, v. 36, n. 4, p. 823-828, 2014.

PG194

O princípio de Landauer, emaranhamento e decoerência

MOUSSA, M. H. Y.¹; SILVA, R. M.¹

ramises.martins@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste projeto pretendemos revisitar o princípio de Landauer (1), que assegura um aumento de entropia do universo, igual a $k_B \ln 2$, quando se apaga um bit de informação (sendo k_B a constante de Boltzmann). Mais especificamente, devemos revisitar a formulação de não-equilíbrio do princípio de Landauer (2), recentemente proposta, além da extensão do princípio para se apagar emaranhados quânticos. No caso da formulação de não-equilíbrio do princípio de Landauer (2), os autores contemplam apenas o caso de um único sistema em contato com o meio ambiente. Podemos então estender esta abordagem para o caso de dois ou mais sistemas emaranhados em duas situações distintas: quando todos os sistemas encontram-se em contato com o mesmo reservatório térmico ou quando cada qual acopla-se ao seu respectivo reservatório térmico. Em se tratando da extensão do princípio de Landauer para se apagar emaranhados quânticos (2), pretendemos saber como o custo termodinâmico para se apagar informação cresce quando consideramos um emaranhado multipartido de dimensão $d_1 \times d_2 \times \dots$. Por outro lado, pretendemos encontrar alguma conexão entre o princípio de Landauer e o processo de decoerência de estados de sistemas em contato com o meio ambiente. Na ref. (3), sustenta-se que o meio ambiente não apaga o estado inicial do sistema, mas apenas embaralha esta informação. Dessa forma, o estado puro inicial do sistema, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ evolui para uma mistura estatística de estados que contempla o vetor de estado $|\psi\rangle$, na forma $\rho = p_k |\psi\rangle\langle\psi| + p_\varphi |\varphi\rangle\langle\varphi| + \dots$. Como se dá este processo de embaralhamento da informação à luz do princípio de Landauer? isto é, qual o custo termodinâmico deste embaralhamento e como este custo se compara àquele quando se apaga a informação?

Palavras-chave: Landauer. Emaranhamento. Decoerência.

Referências:

1 LANDAUER, R. Irreversibility and heat generation in the computing process. **IBM Journal of Research and Development**, v. 5, n. 3, p. 183-191, 1961.

2 GOOLD, J.; PATERNOSTRO, M.; MODI, K. **A non-equilibrium quantum Landauer principle**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1402.4499>>. Acesso em: 25 ago. 2014.

3 HORODECKI, M. et al. Local versus non-local information in quantum information theory: formalism and phenomena. **Physical Review A**, v. 71, n. 6, p. 062307-1-062307-1-25, 2005.

PG195

Determination of protein-protein complexes from sparse experimental data

SILVA, S. R.¹; MONTALVAO, R. W.¹

samuelsilva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The great majority of cellular processes depend on the formation of transient or permanent macromolecular complexes. Structural information about these complexes at low to intermediate resolution can be obtained through a range of techniques. When structures at high resolution are instead required, X-ray crystallography is yet unrivalled. There are, however, often cases in which it is possible to crystallize the molecular units individually but not as a complex, or in which a crystal can be obtained for a complex but not in a biological relevant conformation. Several computer programs have been developed for high-resolution protein-protein docking. The objective of this project is to develop new computational approaches for determining the structures of protein-protein complexes using sparse experimental information. For that, it is being developed a new computer program using data derived from EPR Double Electron-Electron Resonance (DEER) and Cryo-Electron Microscopy (Cryo-EM). We have identified the combined use of advanced geometric models (1-2) with chemical shifts from NMR spectroscopy, EPR Double Electron-Electron Resonance and Cryo-Electron Microscopy as the most promising approach for this purpose, since the experimental data is readily measurable, at least with respect to other observables, and comparatively rich in structural information. This system will complement the Chemical Shift based approach used by CamDock. (3) Our intention is to provide a new standard tool to the structural biology community to determine the structures of large complexes, which are the basic functional units in the cell, rather than the structures of individual proteins or small complexes, which currently represent the vast majority of the structures in the Protein Data Bank. It is expected that the use of complementary experimental data will allow us to improve the quality of protein-protein modelling.

Palavras-chave: Structural bioinformatics. Proteins. Molecular docking.

Referências:

- 1 DUNCAN, B. S.; OLSON, A. J. Approximation and characterization of molecular surfaces. **Biopolymers**, v. 33, n. 2, p. 219-229, 1993.
- 2 SHEN, L.; MAKEDON, F. Spherical mapping for processing of 3D closed surfaces. **Image and Vision Computing**, v. 24, n. 7, p. 743-761, 2006.
- 3 MONTALVAO, R. W. et al. Structure determination of protein-protein complexes using nmr chemical shifts: case of an endonuclease colicin-immunity protein complex. **Journal of the American Chemical Society**, v. 130, n. 47, p. 15990-15996, 2008.

PG196

BEC dynamics with solitons and vortices

SMAIRA, A. F.¹; CARACANHAS, M. A.¹; BAGNATO, V. S.¹

andre.smaira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The Bose-Einstein Condensates (BEC) are excellent macroscopic systems to observe the quantum behavior of matter. Since its experimental production, there are important aspects related to this system that have been intensively explored, like the collective modes of the harmonic trap BEC, (1) its tunneling through a potential barrier (2) and the excited states of this system (including vortices and solitons). (3) In this work, we investigate, using C++ and xmds2 simulations, in one- and two-dimensional systems with, respectively, solitons and vortices, some collective modes (1D dipolar mode, 2D vortex precession, 2D vortex-antivortex dipole) and the singular aspects that coming from the tunneling of a composite system. We study the movement frequency changes of the excitations to explain the new aspects presented by our system. In 1D system the barrier causes solitons divisions into smaller ones due to energy loss. In 2D system, the energy loss causes the increase of trajectories radius.

Keywords: Bose-Einstein condensate. Ultracold atoms. Atomic physics.

Referências:

- 1 PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. **Bose-Einstein condensation**. New York: Oxford University Press, 2003.
- 2 DUAN, Z.; FAN, B.; YUAN, C.-H.; CHENG, J.; ZHU, S.; ZHANG, W. Quantum tunneling time of a Bose-Einstein condensate traversing through a laser-induced potential barrier. **Physical Review A**, v. 81, n. 5, p. 055602, 2010.
- 3 PARKER, N. **Numerical studies of vortices and dark solitons in atomic Bose-Einstein condensates**. 2004. 253 p. Ph D. Thesis (Physics) - Department of Physics, Durham University, Durham, 2004.

PG197

Superabsorção via engenharia de interações átomo-campo e a derivação do princípio de Landauer a partir da segunda lei da termodinâmica

SOARES, P. M. S. B.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

pmssoares02@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Uma vez constatada a natureza discreta da luz, o estudo da sua interação em escala microscópica com a matéria trouxe consequências que vão desde o advento da Mecânica Quântica em 1900 com o trabalho de Planck sobre a radiação de corpo negro até a invenção do laser. A abordagem de aspectos clássicos do eletromagnetismo sob o respaldo da teoria quântica fez surgir uma nova área, conhecida como óptica quântica, que veio a se tornar um terreno fértil para a realização dos protocolos propostos em informação e computação quântica. Originalmente previsto por Dicke em 1954, o fenômeno da superradiância tem gerado grande interesse desde então por se tratar de um efeito transiente coletivo. O sistema é composto por N átomos de dois níveis que interagem com um particular modo do campo de radiação de uma cavidade com baixo fator de qualidade. (1) Mesmo tratando-se de uma amostra moderadamente densa, os átomos não interagem de forma direta. Caso a relaxação ocorra num intervalo de tempo suficientemente longo, as correlações entre os momentos de dipolo atômicos, induzidas via campo, ocasionarão a emissão de um pulso superradiante cuja intensidade é proporcional a N^2 , diferente da emissão incoerente que possui intensidade proporcional a N . Em outras palavras, a energia armazenada em cada um dos átomos é transferida de forma ordenada para o campo em uma certa taxa a depender do estado inicial em que o sistema é preparado. A hipótese sobre a fácil dissipação do modo da cavidade permite a eliminação adiabática dos graus de liberdade do campo e assim encontrar uma equação mestra na forma de Lindblad para os N átomos. Resultados semelhantes podem ser obtidos para a mesma amostra agora em contato com um banho térmico. Através da técnica de campo médio, (2) chega-se à equação mestra para um único átomo e ao Hamiltoniano não-linear que carrega informações fundamentais ao entendimento do fenômeno. Dado que existe a superradiância e que o ferramental para estudá-la está consolidado, seria possível criar a superabsorção por meio da engenharia de interações átomo-campo? De imediato, este resultado viabilizaria o "super-átomo". A termodinâmica quântica tem recebido destaque por utilizar-se de conceitos macroscópicos como trabalho e calor para o estudo de sistemas físicos microscópicos. Recentemente, mostrou-se que o trabalho líquido num certo ciclo é limitado pelo princípio de incerteza entrópico (3) e que violá-lo implicaria na violação da segunda lei da termodinâmica! Por sua vez, a escolha errada da medida durante uma de suas etapas leva à realização de trabalho pelo agente externo sobre o ciclo, o que pode estar conectado com o princípio de Landauer. Apoiados nos sistemas físicos da óptica quântica esperamos responder tais questões e outras que por ventura surgirem.

Palavras-chave: Óptica quântica. Informação quântica. Termodinâmica.

Referências:

- 1 TEMNOV, V. V.; WOGGON, U. Superradiance and subradiance in a inhomogenously broadened ensemble of two-level systems coupled to a low-Q cavity. **Physical Review Letters**, v. 95, n. 24, p. 243602, 2005.
- 2 MIZRAHI, S. S.; MEWES, M. A. Pulsed superradiant emission from a magnetic dipole system. **International Journal of Modern Physics B**, v. 7, n. 12,1993. doi: 10.1142/S0217979293002882 .
- 3 HANGGI, E.; WEHNER, S. A violation of the uncertainty principle implies a violation of the second law of thermodynamics. **Nature Communications**, v.4, n.1670, Apr.2013. doi:10.1038/ncomms2665.

PG198

Strong coupling regime in the interaction of surface plasmon polaritons and excitons in InAs/GaAs quantum dots

SOBREIRA, F. W. A.¹; PEREIRA, R. G.¹; MAREGA JUNIOR, E.¹

wellysson@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The interest in Surface Plasmon Polaritons (SPPs) has grown since the work by Ebbesen (1) that reported an *Extraordinary Optical Transmission* of light when crossing a regular array of holes fabricated in a thin metallic film. One of the focuses of this work was the study of light to develop novel devices based on photonics. As a result it was observed a strong coupling of light with SPPs and the possibility of manipulating light below the diffraction limit, the main subject of a new area so forth named *Plasmonics*. It has also been demonstrated (2) that SPP modes propagating in a finite metallic nanowire have a well-defined wavelength, as in a Fabry-Perot cavity. In parallel to these studies, the interaction of SPPs with semiconductor quantum emitters has proved to be an important decay channel (3) that can lead to non-trivial effects on the propagation of SPPs and excitation of these quantum emitters. Although the interaction of SPPs with semiconductors is important in the technological point of view, there is no study in the literature exploring the quantum effects that may arise from this interaction. Our objective in this presentation is to show some results obtained on the interaction of excitons in InAs/GaAs quantum dots (QDs), due to its transition energy in the near infrared spectra (around 1,1 eV), and SPPs propagating in a thin metallic cylindrical nanowire made of gold. The effect of this interaction was studied theoretically for Au nanowires of 100nm radius. These nanowires can be fabricated by using electron lithography and some other approaches used in our group are based on ion lithography. We obtained a Jaynes-Cummings type Hamiltonian with multiple modes that describes the dynamics of the interacting system. We demonstrate that for these geometries it is possible to achieve a strongly interacting regime in the SPP-QD coupling. We study the interacting system in the limit of low excitation of the QDs where, after performing a Holstein-Primakoff transformation, the Hamiltonian can be diagonalized analytically. Due to this coupling we observe effects such as *Rabi Splitting*, which consists in a level anticrossing of the QD energy and SPP dispersion in the nanowire. New collective modes that arise as a result of this level splitting are hybrid quasi-particles that resembles characteristics of both excitons in the QDs and the SPP excitation in the nanowire. Using linear response theory, we analyze how the Rabi splitting can be observed in the frequency-resolved transmittance through a finite metallic nanowire. We also discuss the effects of strong nonlinearities induced by the SPP-QD coupling. These results are of great importance for applications of plasmonics in quantum optics as well as establishing a new platform for the study strongly interacting systems in condensed matter physics.

Keywords: Plasmonics. Strong coupling. Exciton.

Referências:

1 EBBESEN, T. W. et al. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays.

Nature, v. 391, n. 6668, p. 667-669, 1998.

2 DITLBACHER, H. et. al. Silver nanowires as surface plasmon resonators. **Physical Review Letters**, v. 95, n. 25, p. 257403-1-257403-4, 2005.

3 KHURGIN, J. B.; SUN, G. Enhancement of light absorption in a quantum well by surface plasmon polariton. **Applied Physics Letters**, v. 94, n. 19, p. 191106-1-191106-3, 2009.

PG199

Ideal thickness for PAMAM/SWNT bilayers in EIS biosensors

SOUSA, M. A. M.¹; SIQUEIRA JUNIOR, J. R.²; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹

marcos.moura@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Exatas, Naturais e Educação - UFTM

Coupled with the current proliferation of field effect devices technologies, electrolyte-insulator-semiconductor (EIS) biosensors have the potential to revolutionize biomolecules diagnosis by detecting enzymatic reactions through capacitive measurements. (1) Unfortunately, a quantitative understanding of what determines the flat band potential, an important parameter to calibrate such devices yielding an improved sensibility, is still missing. (2) We report that polyelectrolytes, used in ions transport from enzymes to electrolyte-insulator interface, modify the flat band potential. The PAMAM/SWNT bilayers were adsorbed on $Ta_2O_5/SiO_2/Si$ chips with Al ohmic contact using Layer-by-Layer (LbL) technique and measured using Impedance Spectroscopy (IS). The spectra were fitted using equivalent circuit model which one of interesting parameters obtained was the depletion capacitance. Depletion capacitance decreases with the bilayers increasing which is explained by spatial charge region arising suggesting accumulated positive charges at electrolyte-insulator interface. This shows the influence of polyelectrolytes charges in the EIS energy levels and consequently the flat band potential change. This understanding paves the way for optimization of such devices based on flat band potential adjustment.

Keywords: Electrolyte-insulator-semiconductor . Biosensors. Equivalent circuit model.

Referências:

1 ABOUZAR, M. H. et al. Capacitive electrolyte-insulator-semiconductor structures functionalised with a polyelectrolyte/enzyme multilayer: new strategy for enhanced field-effect biosensing. **Physica Status Solidi A**, v. 207, n. 4, p. 884-890, 2010.

2 SIQUEIRA JUNIOR, J. R. et al. Penicillin biosensor based on a capacitive field-effect structure functionalized with a dendrimer/carbon nanotube multilayer. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 25, n. 2, p. 497-501, 2009.

PG200

Estudo da diversidade química e biológica de moduladores e alvos biológicos para terapia da doença de Chagas

SOUZA, A. S.¹; ANDRICOPULO, A. D.¹

anacletoasilvadesouza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo desse trabalho é utilizar métodos e estratégias em química medicinal e computacional para criação de uma base de dados, e essa base contenha a diversidade química e biológica. Para isso, fez uma análise de informação e geração de modelos 2D para o planejamento de novos candidatos a fármacos anti- *T. cruzi*. Partindo da base de dados, fez-se seleção de dois artigos de Keenan e colaboradores (1-2) que continham moléculas com a mesma similaridade químico-estrutural, e desenhou-se as moléculas no programa SYBYL (130 moléculas), minimizando-se suas energias. Possuindo os valores de pIC50 dessas séries a partir do SAR, fez-se um estudo de HQSAR, gerando modelos a partir de 80% do conjunto treinamento e 20% para conjunto teste, para validação externa. Obteve-se para q^2 , r^2 e r^2_{pred} respectivamente 0,81 e 0,6 e 0,7. O próximo passo dessa estratégia, é usar a mesma base de dados formulada para o HQSAR, e fazer um alinhamento molecular usando algoritmo genético (GALAHAD e GASP), por elementos farmacóforicos e por sub-estrutura comum, e gerar modelos de QSAR-3D. Por fim, fazer uma análise comparativa dos descritores moleculares 3D e comparar com o HQSAR e gerar novos moduladores para combater a doença de Chagas.

Palavras-chave: Doença de Chagas. Novos moduladores. *Trypanosoma cruzi*.

Referências:

- 1 KEENAN, M, et al. Design, structure-activity relationship and in vivo efficacy of piperazine analogues of fenarimol as inhibitors of *Trypanosoma cruzi*. **Bioorganic & Medicinal Chemistry**, v.21, n.7, p.1756-1763, 2013.
- 2 KEENAN, M. et al. Analogues of Fenarimol are potent inhibitors of *Trypanosoma cruzi* and are efficacious in a murine model of Chagas disease. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 55, p.4189-4204, 2012. dx.doi.org/10.1021/jm2015809 —.

PG201

Planejamento e otimização de novos inibidores da enzima cruzaina de *Trypanosoma cruzi*

SOUZA, M. L.¹; ANDRICOPULO, A. D.¹

marianalaureano@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A doença de Chagas, uma infecção causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, é um grave problema de saúde. Aproximadamente 8 milhões de pessoas em todo mundo estão infectadas pelo parasita, mas a situação é mais agravante na América Latina, onde a doença é endêmica. Ainda hoje é grande a necessidade de novas alternativas terapêuticas, pois os fármacos disponíveis são extremamente deficientes, devido principalmente, à baixa eficácia e alta toxicidade. Na busca de um alvo biológico relevante, a enzima cruzaina, uma cisteíno-protease essencial à sobrevivência do parasita, destaca-se na busca e desenvolvimento de novos agentes antichagásicos. (1) Neste contexto, o objetivo deste trabalho é o planejamento e a otimização de novos inibidores da enzima cruzaina, através da integração de técnicas experimentais e computacionais em química medicinal. A otimização molecular de dois novos inibidores não covalentes da cruzaina (um composto derivado de benzolactona proveniente da base líder-similar que apresentou um valor de $IC_{50} = 20 \mu M$ e um derivado imidazólico proveniente da base fragmento-similar com $IC_{50} = 0,58 \mu M$), descobertos através de metodologias de triagem virtual de grandes bases de dados de compostos, está sendo explorada neste trabalho. (2) Modificações estruturais desses dois novos inibidores buscam maior complementaridade com os subsítios da cruzaina, tornando-os mais potentes e com maior afinidade pela enzima. Após o planejamento, esses compostos serão sintetizados e futuramente testados em ensaios *in vitro* contra a enzima cruzaina e também em cultura celulares de fibroblastos infectadas com parasitas. Com a integração de métodos experimentais e computacionais buscamos identificar inibidores da cruzaina inéditos, relevantes para o desenvolvimento de candidatos a novos fármacos para a terapia da doença de Chagas.

Palavras-chave: Cruzaina. *Trypanosoma cruzi*. Química medicinal.

Referências:

1 FERREIRA, R. S.; DESSOY, M. A.; PAULI, I.; SOUZA, M. L.; KROGH R.; SALES, A. I. L.; OLIVA, G.; DIAS, L. C.; ANDRICOPULO A. D. Synthesis, biological evaluation, and structure activity relationships of potent noncovalent and nonpeptidic cruzain inhibitors as anti-*Trypanosoma cruzi* agents. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 57, n. 6, p. 2380-2392, 2014.

2 SOUZA, M. L. **Identificação de novos inibidores da enzima cruzaina de *Trypanosoma cruzi* candidatos a fármacos contra a doença de Chagas**. 2012. 84 p. Dissertação (Física Aplicada Biomolecular) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

PG202

Modular system for non-real-time subsystem management in Nuclear Magnetic Resonance Digital Spectrometer

SOUZA, P. V. B. D.¹; COELHO, F. B.¹; PIZETTA, D. C.¹; SILVA, D. M. D. D.¹; MARTINS, M. J.¹; VIDOTO, . L. G.¹; TANNUS, A.¹

pedrovduarte@bol.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) is a very versatile technique, since it is used to investigate problems in many areas such as biology, chemistry, physics and engineering. The equipment used in NMR are those commercially available which have a number of restrictions to be used in scientific researches. Facing these issues, the Research Group Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética (CIERMag) developed a spectrometer specifically for scientific researches. (1) One of the project premises is the spectrometer versatility in order that the same equipment can be reconfigured to operate, ideally, in all kinds of NMR experiments. To fulfill this objective, the spectrometer needs a support system capable to manage all experiment peripheral components, and it is the objective of this work . This peripheral system was divided into many modules, each one will manage one set of devices, such as radiofrequency module, bed* module and sample module. The element responsible for each module is a Raspberry Pi, which is an ARM processor with graphic processor integrated, mounted on a development board running Raspbian, a specialized Linux version. The Raspberry communicates with the sensors and actuators via SPI interface with Current Loop. Each sensor and actuator will have a data sheet based on the IEEE 1451 standard, whose information will be used in the automatic configuration of the system. A computer terminal, currently employed to develop the NMR experiments methodology, will be utilized to setup the peripheral devices, so it will send the experiments parameters to be processed in the Raspberry then resend to the actuators and the measured parameters in the sensors will be send from the Raspberry back to the computer terminal. All software will be developed in Python.

Keywords: Transducer electronic data sheet. Non-real-time subsystem. Nuclear magnetic resonance digital spectrometer.

Referências:

1 SILVA, D. M. D. D. et al. Subsistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados do espectrômetro digital de RM: ToRM console. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE FÍSICA MÉDICA, 18., 2013, São Pedro. **Resumos...** São Pedro: ABFM, 2013. p. 245-248.

PG203

Characterization of excited electronic states in free-base porphyrin molecules

SOUZA, T. G. B¹; DEBONI, L.¹

tiago.gualberto.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Porphyrin molecules and their derivatives are very present in several aspects in human life. Besides of their application in industries, mainly due to its intense optical absorption in the visible region, high photostability and photodynamic activity, the porphyrin molecule is responsible by the gases exchange of red blood cells. Because of these characteristics, the understanding of their energy structure and spectroscopic parameters are extremely useful. Also their high nonlinear optical effect and relative fast response times, arising from two-dimensional conjugated π -electron systems, makes them promising candidates for applications of photonic devices, such as optical limiters and switches. However for all porphyrin applications, it is important to characterize the photo-physical parameters of their energy states, which include absorption cross-sections, excited states lifetimes, and quantum yields. This work reports the techniques employed and the preliminary results. All the probed samples have the same porphyrinic core, but with different kind of radicals attached to it. Each radical changes the electronic distribution of the whole molecule, then changing their spectroscopic parameters. Several kinds of radicals have been used in order to figure out which one of them is best for a specific application. It was employed traditional linear spectroscopic techniques as absorbance and fluorescence time decay, that are responsible for the cross-section and lifetime of the first singlet excited state. Furthermore, non-linear spectroscopic techniques were employed: Z-Scan by Single Pulse (**ZSSP**), Pulse Train Z-scan (**PTZC**), (1) Pulse Train Fluorescence (**PTF**). (2) By using these three combined techniques, we were able to determine the cross-section of the second singlet excited state, the triplet excited state cross-sections and the inter-system crossing time (singlet-triplet population exchange). In the non-linear techniques it was essential to use a frequency doubled, Q-switched, and mode-locked Nd:YAG laser. That laser produces a pulse train containing about thirty eight pulses at 532 nm, 70ps time-width, separated by 13 ns intervals and spanning a range of over 400 ns. A manifold energy system provides a theoretical model to fit the experimental results. Although the rate equation model (3) is a system of differential equations and demands a numerical solution. Consequently, by numerically solving the population dynamics between the states using a set of rate equations, the electron population dynamics parameters are determined.

Keywords: Non-linear optics. Spectroscopy. Porphyrin.

Referências:

1 MISOGUTI, L.; MENDONÇA, C. R.; ZILIO, S. C. . Characterization of dynamic optical nonlinearities with pulse trains. **Applied Physics Letters**, v.74, p.1531, 1999.

2 DE BONI, L. et al. Pulse train fluorescence technique for measuring triplet state dynamics. **Optics**



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

Express, v.19, n.11, p.10813-23, May 2011.

3 BARBOSA NETO, N. M. et al. Dynamic saturable optical nonlinearities in free base tetrapyrridylporphyrin. **Journal of Porphyrins Phthalocyanines**, v.7, p. 452-456, 2003.

PG204

Identification of Mn/FeSODs structural determinants necessary to metal specificity

STELMASTCHUK, L. B. F.¹; BACHEGA, J. F. R.²; GARRATT, R. C.³; FERREIRA JÚNIOR, J. R. S.¹

laure@usp.br

¹Escola de Artes, Ciências e Humanidades - USP

²Laboratório de Bioinformática, Modelagem e Simulação de Biosistemas - PUCRS

³Instituto de Física de São Carlos - USP

Superoxide dismutases (SODs) are metalloenzymes that convert the superoxide anion in molecular oxygen (O₂) and hydrogen peroxide (H₂O₂). The metal in the catalytic center of such enzymes is directly related to their catalysis mechanisms and tridimensional structures. Evolutionarily, FeSOD and MnSOD may have evolved from a common ancestor, because both proteins have homologous primary sequences and superposable crystallographic structures. However, at the catalytic level, both proteins diverged sufficiently to prevent interchange of their metallic centers, which would generate non-functional enzymes, indicating that these proteins have high metal specificity. The objective of this work is to identify structural determinants of Fe/MnSODs necessary to metal specificity for *Trichoderma reesei* manganese superoxide dismutase (TrMnSOD) (1), and *Trypanosoma brucei* iron superoxide dismutase (TbFeSODB2) (2) by X-ray crystallography. We intend to use statistical coupling analysis (SCA) to select amino acid residues for site-directed mutagenesis in TbFeSODB2. Mutant genes were constructed and their proteins expressed, purified and submitted to crystallization. Classics II and PEG II NeXtal suites were used for condition screen in a sitting drop vapour diffusion method at 18°C. Hanging drop method was used for optimization. The enzymatic activities was qualitatively analysed by in-gel SOD assay. The following stages of the project will involve SOD activity assay with xantine oxidase method as well as electron paramagnetic resonance (EPR) for metal coordination analysis. We hypothesize that SCA is useful to identify amino acid candidates for site-directed mutagenesis to design new SODs with intermediated Fe/Mn specificity, and even metal specificity interconversion, by studying the evolutionary history of these proteins.

Keywords: Metalloprotein. Superoxide dismutase. Metal specificity.

Referências:

1 CHAMBERGO, F. S. et al. Conformational stability of recombinant manganese superoxide dismutase from the filamentous fungus *Trichoderma reesei*. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 50, n. 1, p. 19-24, 2012.

2 BACHEGA, J. F. R. et al. Systematic structural studies of iron superoxide dismutases from human parasites and a statistical coupling analysis of metal binding specificity. **Proteins**, v. 77, n. 1, p. 26-37,



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

2009.

PG205

Detecção de infravermelho para diagnóstico de tumores não profundos

STRINGASCI, M. D.¹; SALVIO, A. G.²; BAGNATO, V. S.¹; KURACHI, C.¹

mirianstringasci@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Fundação Amaral Carvalho

O câncer é uma das principais causas de óbito no mundo, porém, as chances de sobrevivência são muito maiores quando diagnosticado em estágios iniciais. Na literatura, já se sabe que as lesões tumorais presentes no tecido apresentam maior temperatura se comparado com a parte sadia do tecido, devido a grande vascularização presente nestas lesões. (1) Pensando nesta diferença de temperatura algumas ferramentas e pesquisas na área da termografia vem sendo desenvolvidas. Pois, além de ser uma técnica não invasiva, não é depositado dose de radiação sobre o paciente, garantindo que nenhum dano vascular seja causado. (2) A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma modalidade terapêutica alternativa para o tratamento de lesões tumorais. Na TFD, um fotossensibilizador (FS) é administrado localmente ou sistemicamente, depois de um tempo de biodistribuição, o FS se acumula preferencialmente no tecido tumoral e o local é irradiado com luz de comprimento de onda mais apropriado. A absorção da luz pelo FS inicia reações fotoquímicas que geram produtos citotóxicos (espécies reativas de oxigênio) que levam as células tumorais à morte. (3) Este estudo pretende investigar a possibilidade de distinguir os diferentes tipos de lesões de pele através de sua alteração térmica, além de diferenciar outros aspectos como tamanho, profundidade e agressividade da lesão. Outro fator que será analisado é a resposta térmica de lesões durante o tratamento TFD, comparando com o resultado do tratamento. Este projeto é dividido em duas partes: estudo em animais e estudo clínico. No estudo em animais, estão sendo usados 30 camundongos Swiss, seu dorso é tricotomizado e injetado células de tumor de Ehrlich, o crescimento do tumor é acompanhado, através de imagens da câmera de infravermelho Fluke® modelo FLK-Ti400 a cada 2 dias até que a lesão chegue a um tamanho de 1cm de diâmetro. Então, a TFD é realizada utilizando FS Photogem®. A detecção de temperatura é realizada após a incubação, durante a irradiação, a cada hora durante as 6 primeiras horas e a cada 24 horas durante sete dias. Desta forma foi possível ajustar a curva de crescimento do tumor e de sua regressão após ser aplicada a TFD. O estudo clínico está sendo realizado no Hospital Amaral Carvalho em Jahu, um total de 700 lesões de pele (dos tipos carcinoma baso celular, queratose actínica, melanoma, nevo displásico, hiperplasia sebácea, nevo intradérmico e queratose seborreica pigmentada) estão sendo registrada com a FLK-Ti400. Então, 100 lesões dos tipos carcinoma baso celular e queratose actínica, que usualmente são tratadas com TFD, também tem sua alteração térmica registrada. Com as imagens obtidas até o momento, está sendo possível classificar a malignidade da lesão através de sua alteração térmica, além de delimitar seu tamanho. Para avaliar o resultado da TFD nas lesões tratadas, serão analisados as biópsias dos pacientes que são realizadas 30 dias após o tratamento. Neste estudo mostramos que a termografia pode ser uma importante ferramenta no diagnósticos de lesões superficiais, pois complementa a avaliação clínica do paciente.

Palavras-chave: Termografia. Imagens de infravermelho. Terapia fotodinâmica.

Referências:

1 WOODBURN, K.W.; FAN, Q.; KESSEL, D.; LUO, Y.; YOUNG, S. W. Photodynamic therapy of B16F10 murine melanoma with lutetium texaphyrin. **Journal of Investigative Dermatology**, v.110, n. 5, p. 746-751, 1998.

2 KENNEDY, D.A.; LEE, T.; SEELY, D. A. Comparative review of thermography as a breast cancer screening technique. **Integrative Cancer Therapies**, v. 8, n. 1, p. 9-16, 2009.

3 WILSON, B. C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. R61-R109, 2008.

PG206

Formulações nanoestruturadas contendo curcumina na otimização da terapia fotodinâmica

SUZUKI, I. L.¹; INADA, N.¹; KURACHI, C.¹; ZUCOLOTTO, V.¹; SILVA, A. P.¹; MARANGONI, V. S.¹

isalsuzuki@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A curcumina é um composto fenólico natural amarelo, extraída do açafrão (*Curcuma longa* Linn). É um antioxidante natural e demonstrou muitas atividades farmacológicas, tais como anti-inflamatório, antimicrobiana e anticâncer em estudos pré-clínicos e clínicos. A curcumina também tem um grande efeito fungicida que pode ser aplicada na terapia fotodinâmica (TFD), ela é utilizada como fotossensibilizador (FS) e age em infecções superficiais localizadas na pele. Nesse caso ela é utilizada como uma terapia alternativa no tratamento de infecções fúngicas da pele e das unhas. (1) No entanto, a curcumina possui baixa solubilidade em solução aquosa e propriedades altamente hidrofóbicas, o que resulta em uma baixa biodisponibilidade sistêmica e dificulta o seu uso como agente terapêutico. Portanto, foram aplicadas e desenvolvidas novas técnicas para superar essa limitação. As principais estratégias para superar as limitações físico-químicas da curcumina e para aumentar a sua biodisponibilidade são baseadas no carregamento do composto em nanocarregadores, que são de vários tipos, tais como as nanopartículas poliméricas, micelas, ciclodextrinas, dispersões sólidas, emulsões, nanopartículas lipídicas, lipossomas, transportadores de péptidos, etc. Estes nanocarregadores além de serem pequenos, podem ser utilizados para a administração dirigida de drogas (grande afinidade pela célula-alvo). As nanopartículas são usadas para proteger o composto encapsulado de uma degradação prematura, melhorar a sua solubilidade em água, promover sua liberação controlada em sistemas e também podem ser utilizadas para atingirem uma célula-alvo. Também melhora a especificidade da droga, a eficácia, tolerabilidade da terapêutica, e diminui o risco de toxicidade. (2) A imobilização de FS em nanopartículas constitui uma grande alternativa para ultrapassar as dificuldades encontradas com o FS livre. Em sua maior parte, as nanopartículas são usadas como transportadores/carregadores de FS hidrofóbico, melhorando a dispersão destes em sistemas aquosos. Os nanocarregadores devem ser capazes de incorporar o FS, sem que ele perca ou altere sua atividade. (3) A fim de unir as duas técnicas (TFD e formulações nanoestruturadas), este estudo teve como objetivo desenvolver nanopartículas contendo curcumina encapsulada para melhorar sua solubilidade aquosa e assim otimizar seu efeito na TFD em fungos, e medir a eficácia de tais formulações *in vitro* e comparar os resultados com os testes com solução aquosa de curcumina livre. Para a caracterização das nanopartículas foram realizados os ensaios de liberação do FS, de proteção contra luz (no comprimento de onda da curcumina, 450 nm), de degradação conforme o tempo, foi determinado o tamanho da partícula, o seu índice de polidispersão e o seu potencial zeta. Para os testes *in vitro* foram utilizados dois fungos diferentes, *Candida albicans* e *Mycrosporium gypseum*, tanto as nanopartículas como a curcumina livre em solução aquosa foram testadas, para posterior comparação e análise.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Curcumina. Nanopartículas.

Referências:

1 DETTY, M. R.; GIBSON, S. L.; WAGNER, S. J. Current clinical and preclinical photosensitizers for use in photodynamic therapy. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 47, n. 16, p. 3897-3915, 2004.

2 NAKSURIYA, O.; OKONOGI, S.; SHIFFELERS, R. M.; HENNINK, W. E. Curcumin nanoformulations: a review of pharmaceutical properties and preclinical studies and clinical data related to cancer treatment. **Biomaterials**, v. 35, n. 10, p. 3365-3389, 2014.

3 TSAI, Y. M. et al. Curcumin and its nano-formulation: the kinetics of tissue distribution and blood-brain barrier penetration. **Internacional Journal of Pharmaceutics**, v. 416, n. 1, p. 331-338, 2011.

PG207

Excitations in a perturbed ^{87}Rb Bose-Einstein condensate

TAVARES, P. E. S.¹; FRITSCH, A. R.¹; BAHRAMI, A.¹; TONIN, Y. R.²; TELLES, G. D.¹; HENN, E. A. L.¹; BAGNATO, V. S.¹

pedro.ernesto.tavares@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Our research group has studied the effects caused by application of external fields in a Bose-Einstein condensate. In a first series of studies, exciting a Bose-Einstein condensate by an oscillatory magnetic field, we observed an out-of-phase oscillation between the BEC and thermal cloud (1), vortex formation (2), quantum turbulence (3) and the BEC fragmentation. However these studies left a few open questions concerning on the experimental way to reproduce those interesting phenomena. Here, we report the built of the new experimental system to produce a Bose-Einstein condensate (BEC), the results obtained about collective modes, self-similar expansion, momentum distribution of the excited BEC and our recent generation of vortices in the superfluid. To reach the BEC, our experimental system is a double-MOT where the first MOT (MOT1) is the source of atoms to the second MOT (MOT2). The MOT1 is produced in a high-vacuum chamber (4×10^{-9} Torr) and the MOT2 is in the ultra-high-vacuum (1×10^{-12} Torr) region, necessary for the production of Bose-Einstein. In MOT2 are loaded 5×10^8 atoms in 30 seconds. After loading the MOT2, we transferred these atoms to a harmonic magnetic trap (QUIC trap), where started the process of evaporative cooling by radio frequency. Performed self-sustained, the evaporative cooling ramp leads to quantum degeneracy. After the optimization of this process, we have a BEC with 2×10^5 atoms in the QUIC trap. After achieving condensation, with the trapping field still on, we introduce a magnetic perturbation in this potential. This additional field is generated by a pair of coils in anti-Helmholtz configuration. After this excitation, with the magnetic trap on, we hold the evolution of the sample in the trap. Finally, we switch off the trapping potential, leaving the cloud in a time of flight expansion (TOF) when we make an absorption image of the cloud. For fixed excitation amplitude and changing the hold time of the cloud in the trap, we could identify the dipolar and breathing modes in the perturbed BEC. The presence of the breathing mode is seen for higher excitation amplitudes while the dipolar mode is easily to excited. In the breathing mode, we started to investigate the TOF expansion of the cloud. We saw that the cloud have a self-similar expansion and for larger TOF (up to 25 ms) some structures (looking vortex line) is visible in the cloud. We calculate the momentum distribution of these clouds and this exhibits a power law behavior (as Kolmogorov law for turbulence). We continue the investigation about how to generate BEC with vortices and turbulence as done in the old system. (2-3) Recently we made a new procedure which the generation of vortices is done in a controllable way.

Keywords: Bose-Einstein condensation. Collective modes. Quantum turbulence.

Referências:

1 TAVARES, P. E. S.; TELLES, G. D.; SHIOZAKI, R. F.; CASTELO BRANCO, C.; FARIAS, K. M.; BAGNATO, V. S. Out-of-phase oscillation between superfluid and thermal components for a trapped Bose condensate under oscillatory excitation. **Laser Physics Letters**, v. 10, n. 4, p. 045501-1-045501-6, 2013.

2 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; RAMOS, E. R. F.; CARACANHAS, M. A.; CASTILHO, P.; OLÍMPIO, E. P.; ROATI, G.; MAGALHÃES, D. V.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. . Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n. 4, p. 043618-1-043618-5, 2009.

3 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301-1-045301-4, 2009.

PG208

Engenharia de máquina de stirling, No-Go Theorems e Princípio de Landauer

TEIZEN, V. F.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

victor.teizen@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A termodinâmica de sistemas quânticos, implementados via 'máquinas térmicas quânticas,' (1) tem se mostrado um interessante tópico de pesquisa nos últimos anos, atraindo atenção nos contextos de equilíbrio e fora deste, e tem, até agora, produzido importantes resultados no que concerne sistemas de poucos graus de liberdade sob evoluções temporais quânticas, além de originar uma compreensão mais aprofundada da dinâmica de sistemas longe do equilíbrio, e em particular do processo de transferência de informação de sistemas quânticos quando em contato com um meio ambiente. Neste âmbito, apresentamos um protocolo para construir uma máquina térmica utilizando íons aprisionados sob a ação de um laser com parâmetro de Lamb-Dicke ajustável que utilizaremos para engenheirar um reservatório e controlar os parâmetros que permitirão a construção de uma máquina de Stirling considerando o caso no qual esta é implementada no regime quase-estático. Dentre outras possibilidades de estudo nesta área (a qual alguns chamam de 'termodinâmica quântica'), destacamos em particular o processo de Landauer, que consiste num protocolo para 'apagar' informação do sistema de interesse que permite uma investigação mais profunda sobre a segunda lei da termodinâmica. Como objetivo preliminar, gostaríamos de compreender como funciona tal processo em outros contextos, como, por exemplo, no caso de reservatórios não-markovianos, e tentar encontrar alguma grandeza que possa caracterizar sistemas sob tais processos, utilizando como inspiração as relações de flutuação (como a de Jarzynski) e o ferramental da mecânica quântica de sistemas abertos e da teoria de informação quântica, inspirados em. (2) Além disso, gostaríamos de investigar a existência de uma relação entre a 2ª lei da termodinâmica com os *no-go theorems*, teoremas fundamentais associados à teoria da informação quântica, motivados por resultados recentes como, por exemplo. (3)

Palavras-chave: Termodinâmica quântica. No-Go theorems. Princípio de Landauer.

Referências:

1 QUAN, H. T.; LIU, Y.; SUN, C. P.; NORI, F. Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. **Physical Review E**, v. 76, n. 3, p. 031105, 2007.

2 GOOLD, J.; MODI, K. ; PATERNOSTRO, M. A non-equilibrium quantum Landauer principle. 2014. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1402.4499v1.pdf>>. Acesso em: 13 ago. 2014.

3 HÄNGGI, E; WEHNER, S. A violation of the uncertainty principle implies a violation of the second law of thermodynamics. **Nature Communications** , v. 4. p.1670, 2013. doi:10.1038/ncomms2665.

PG209

Dynamic stability of a multi-charged vortex in Bose-Einstein condensates

TELES, R. P.¹; SANTOS, F. E. A.¹; BAGNATO, V. S.¹

rafael.fisica.unesp@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

We have studied the behavior of a Bose-Einstein condensate in the presence of a multi-charged vortex placed at its center, with emphasis on its the effects over both the collective modes and the free expansion. (1,2) Our model has proven to be effective in analysing the the dynamics of the vortex radius coupled with the condensate collective excitations. (2) Such coupling generates new collective modes which possess significant oscillation amplitudes, where one or more of these modes may be responsible for the instability of the multi-charged vortex. In this work, we assume a Bose-Einstein condensate trapped in a 2D harmonic potential with a multi-charged vortex at its center. Thus we calculate the four most relevant collective modes of this system, where two of them are already known as the breathing (monopole) and the quadrupole modes of the condensate. These modes have the vortex core dynamics practically frozen, whereas they present a small shift in their oscillation frequencies. There are two additional oscillation modes which couple the vortex dynamics with both the breathing and the quadrupole oscillations, where the quadrupole oscillation of the vortex radius is unstable. It means that a multi-charged vortex can decay into a set of singly charged vortices due to this unstable mode. One of the mechanisms used for exciting collective modes is via time-dependent modulation of the s-wave scattering length. This has been already applied to excite the lowest-lying quadruple mode in a lithium experiment. (3) We constructed a stability diagram by varying both the amplitude as well as the frequency of the external excitation. This analysis shows the existence of stable regions where the vortex may not decay.

Keywords: Bose-Einstein condensate. Vortices. Parametric resonance.

Referências:

1 TELES, R. P.; SANTOS, F. E. A.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S. Free expansion of Bose-Einstein condensates with a multicharged vortex. **Physical Review A**, v. 87, n. 3, p. 033622-1-033622-6, 2013.

2 TELES, R. P.; BAGNATO, V. S.; SANTOS, F. E. A. Coupling vortex dynamics with collective excitations in Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 88, n. 5, p. 053613-1-053613-8, 2013.

3 POLLACK, S. E.; DRIES, D.; HULET, R. G.; MAGALHÃES, K. M. F.; HENN, E. A. L.; RAMOS, E. R. F.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S. Collective excitation of a Bose-Einstein condensate by modulation of the atomic scattering length. **Physical Review A**, v. 81, n. 5, p. 053627-1-053627-5, 2010.

PG210

Arquiteturas moleculares de novos sais inorgânicos de lamivudina, um fármaco anti-HIV

TENORIO, J. C.¹; ELLENA, J. A.¹

juanct@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos principais objetivos da engenharia de cristais é o aperfeiçoamento das propriedades farmacêuticas de Insumos Farmacêuticos Ativos. Neste sentido o trabalho discute o *design* de novas formas sólidas da Lamivudina, 3TC, um dos fármacos atualmente mais utilizado e comercializado na terapia antirretroviral contra o HIV. As formas cristalinas apresentadas correspondem aos sais dos ácidos inorgânicos: bromidrato de lamivudina (3TCH-Br), hidrogênio difluoridrato (3TCH-FHF) e nitrato (3TCH-NO₃). Estes novos sais cristalizaram no grupo espacial não-centrossimétrico $P2_1$. Os sais halogenados (3TCH-Br e 3TCH-FHF) exibiram arranjos supramoleculares isoestruturais, similar ao do sal anidro do cloridrato de lamivudina (3TCH-Cl) reportado pelo nosso grupo de pesquisa, e cuja solubilidade no equilíbrio mostrou um incremento considerável quando comparada à forma neutra (forma II). (1-2) A principal característica dos arranjos cristalinos está no ordenamento das unidades catiônicas (regidas pela simetria helicoidal), as quais permitem a formação de vacâncias moleculares na direção [100] onde são localizados os ânions haleto. Entretanto, o sal 3TCH-NO₃ mostrou um arranjo supramolecular diferente aos dos sais halogenados. Aqui é observada a formação de cadeias helicoidais ao longo do eixo *b*, as quais serão empacotadas por simetria translacional formando posteriormente planos moleculares em zig-zague arquitetados e empilhados ao longo do plano [10-1]. Estudos suplementares permitiram acrescentar informação estrutural além da pureza das amostras, tais como difração de raios-X de pó (DRXP), análise vibracional: Infravermelho (IV) e Raman, e análise térmica: calorimetria diferencial de varredura (DSC), termogravimetria (TG) e microscopia térmica *Hot-stage*. Por último, uma avaliação da solubilidade no equilíbrio a temperatura ambiente, permite correlacionar as características cristalográficas e de estado sólido dos sais com esta importante propriedade farmacêutica.

Palavras-chave: Formas cristalinas. Fármacos anti-HIV. Química supramolecular.

Referências:

1 ELLENA, J.; PAPANIDIS, N.; MARTINS, F. T. Toward supramolecular architectures of the anti-HIV drug lamivudine: understanding the effect of the inclusion of water in a hydrochloride form. **CrystEngComm**, v. 14, n. 7, p. 2373-2376, 2012.

2 MARTINS, F. T. et al. Lamivudine salts with improved solubilities. **Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 101, n. 6, p. 2143-2154, 2012.

PG211

Estudos estruturais e funcionais de expansinas, proteínas semelhantes à expansinas e swoleninas & proteômica da bactéria termofílica *Thermogemmatispora* CEPA T88 .

TOMAZINI JUNIOR, A.¹; STOTT, M.²; SPARLING, R.³; LEVIN, D. B.⁴; POLIKARPOV, I.¹

atilio.tomazini@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²GNS Science, Wairakei Research Centre, Taupo - Nova Zelândia

³Department of Microbiology, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba - Canada

⁴Department of Biosystems Engineering, University of Manitoba - Canada

O desafio técnico/científico relacionado ao bioprocessamento de resíduos lignocelulósicos para a produção de biocombustíveis constitui no objetivo geral desta pesquisa. Tendo como alvos específicos o estudo de proteínas auxiliares ao processo de depolimerização de biomassa e na identificação de enzimas lignocelulósicas a partir da proteômica da bactéria termofílica *Thermogemmatispora* cepa T88. Proteínas auxiliares como expansinas, proteínas semelhantes à expansina e swoleninas atuam no processo de conversão e depolimerização de material lignocelulósico cujo mecanismo de ação, apesar de não esclarecido (1), está ligada a um ganho de atividade pelas enzimas celulolíticas quando associada a estas proteínas auxiliares. Dentre as proteínas auxiliares selecionadas para estudo temos a proteína semelhante a expansiva de *Xanthomonas campestris* (XcEXLX1) cuja caracterização funcional demonstra um efeito sinérgico e pH dependente com o coquetel enzimático comercial (Accellerase 1500), aumentando a atividade hidrolítica sobre substrato celulósico. O efeito máximo foi identificado no pH = 3 com um aumento de 140% no açúcar liberado e no pH = 4.8 o aumento foi de 20%. As demais proteínas auxiliares (*T. asperellum* 57959, *T. harzianum* 484109, *T. harzianum* 48.4109, *T. reesei* 12.3992, *T. harzianum* 483395, *T. reesei* 71390, *T. harzianum* 87202) selecionadas para estudo encontram-se na etapa de expressão heteróloga com a determinação de protocolos específicos de purificação para então procedermos com os estudos funcionais e estruturais. Uma característica de extrema importância na busca por novas enzimas é a estabilidade estrutural e funcional. Para isso a proteômica tem contribuído enormemente com a identificação de enzimas envolvidas na hidrólise de material lignocelulósico. Neste contexto foi identificada uma nova bactéria aeróbica, termofílica e lignocelulósica a *Thermogemmatispora* cepa T88 (2), a mesma foi cultivada em diferentes fontes de carbono (alfa-celulose, glucose, extrato de levedura, phytigel, xilano e lignina) e seu ciclo de crescimento foi avaliado para que então iniciássemos os experimentos com proteômica utilizando como fonte de carbono para crescimento alfa-celulose, glucose e extrato de levedura. Aplicando a cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas (LC/MS) obtivemos os conjuntos de proteômica para cada condição e procedemos com a análise e identificação de enzimas lignocelulósicas expressas por T88 para iniciarmos o processo de clonagem, expressão e caracterização bioquímica e estrutural das mesmas. Além disso, testes enzimáticos utilizando o coquetel enzimático produzido por T88 foram realizados permitindo o confronto com os dados obtidos

com proteômica. Portanto, a pesquisa mostra-se promissora quanto à geração de informação para o entendimento do processo de hidrólise de celulose em monossacarídeos fermentescíveis, uma vez que, os resultados com XcEXLX1 foram satisfatórios e com as novas proteínas auxiliares clonadas poderemos traçar um perfil estrutural e funcional das mesmas. Além disso, a proteômica da T88 permitirá a identificação de alvos específicos e com propriedades de termoestabilidade importantes para aplicação industrial ou para geração de conhecimento sobre estrutura e funcionalidade biológica de proteínas.

Palavras-chave: Expansinas. Termofílica. Lignocelulose.

Referências:

1 COSGROVE, D. J. Loosening of plant cell walls by expansins. **Nature**, v. 407, p. 321-326, 2000.doi:10.1038/35030000.

2 STOTT, M. B. et al. . Isolation of novel bacteria, including a candidate division, from geothermal soils in New Zealand. **Environmental Microbiology** v.10, n.8. p.2030-2041, 2008.

PG212

Fabrication of optical microcavities by two-photon polymerization

TOMAZIO, N. B.¹; OTUKA, A. J. G.¹; ALMEIDA, G. F. B.¹; MENDONÇA, C. R.¹

nathaliatomazio@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Microcavities that strongly confine light within small dielectric volumes have found applications in a variety of fields, such as nonlinear optics, quantum electrodynamics and biosensing (1). The fabrication of such microcavities was primarily based on standard lithography method, in which three dimensional structures are created by stacking planar patterns.(3) However, the 3D structures that are produced present geometric limitations and have its resolution restricted to several micrometers due to the layer-by-layer nature of this technique. To overcome this drawback, two-photon absorption induced polymerization has been used as an alternative approach to fabricate optical microcavities.(2) As the quadratic dependence of the two-photon absorption rate on laser intensity allows spatial confinement of the excitation, complex 3D structures can be created using this method. Our microfabrication setup uses a mode-locked Ti:sapphire laser oscillator that delivers 100 fs pulses at 780 nm pulses (86 MHz repetition rate) as the excitation source. The laser beam is introduced into a galvanometric-steering mirror system, responsible for deflecting the beam direction in two dimensions (x-y). The laser beam is then focused with an objective with numerical aperture of 0.85. The stage that supports the photopolymer is scanned vertically, thereby moving the focal volume in three dimensions. By controlling both the galvanometric-mirror system and the stage with computer-aided software, the desired 3D structure can be fabricated. After the fabrication process, the unsolidified photopolymer is taken away by rinsing the sample with a solvent, leaving only the created microstructures on top of the substrate. For the fabricated structures to be used as microcavities, their volume should be spatially homogeneous and their surfaces should have a roughness that is smaller than the wavelength of the light to be employed.(3) In the present moment, we are familiarizing ourselves with the two-photon polymerization technique and devoting some effort to optimize the surface smoothness of the microstructures fabricated by our experimental setup.

Keywords: Microfabrication. Two-photon absorption. Microcavities.

Referências:

- 1 LIU, Z.; LI, Y.; XIAO, Y. Directed laser writing of whispering gallery microcavities by two-photon polymerization . **Applied Physics Letters**, v. 97, n. 21, p. 211105, 2010.
- 2 MARUO, S.; FOURKAS, J. T. Recent progress in multiphoton microfabrication. **Laser & Photonics Reviews**, v. 2, n. 1-2, p. 100-111, 2008.
- 3 LAFRATTA, C. N.; FOURKAS, J. T.; BALDACCHINI, T.; FARRER, R. A. Multiphoton fabrication. **Angewandte Chemie**, v. 46, n. 33, p. 6238-6258, 2007.

PG213

Substituição encontrada no sítio ativo da enzima Metiltioadenosina Fosforilase de *Schistosoma mansoni*, pode explicar o aumento da afinidade pelo substrato alternativo, adenosina.

TORINI, J. R.¹; BRANDÃO NETO, J.²; PEREIRA, H. M.¹

jutorini@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Diamond Light Source - Harwell,UK

Causada pelo parasita *Schistosoma mansoni*, a esquistossomose é uma doença crônica que afeta aproximadamente 270 milhões de pessoas no mundo sendo 6 milhões somente no Brasil. (1) Uma diferença marcante entre o parasita e o hospedeiro humano, é que em *S. mansoni*, na via de salvação de purinas, foi detectada atividade enzimática para uma adenosina fosforilase (2) capaz de converter diretamente adenosina em adenina. A enzima MTAP (EC 2.4.2.28) converte 5'-deoxi-5'-metiltioadenosina (MTA) em adenina livre, mas pode usar também adenosina como substrato alternativo. Ensaios cinéticos utilizando SmMTAP revelaram uma alta afinidade dessa enzima por adenosina em comparação com a MTAP humana, indicando que a fosforólise da adenosina na via de salvação de purinas no verme, acontece pela ação da MTAP. Deste modo essa enzima torna-se um alvo importante na tentativa de bloqueio da via de salvação de purinas. Em comparação com a MTAP humana, a SmMTAP revelou uma substituição (Q289L) que pode explicar a alta afinidade por adenosina. Para investigar esta hipótese, a SmMTAP foi mutada na posição 289 pela empresa *Mutagenex*, a proteína foi expressa em meio 2XTY e purificada usando a técnica de cromatografia por afinidade. A proteína purificada, foi cristalizada em 100 mM Bis-tris pH 6,1-6,5 e 14-18% PEG 3350. Dados de difração de raios-X foram obtidos na linha I04-1 do Diamond Light Source, Harwell,UK. Foram obtidos conjuntos de dados da MTAP mutante Q289L em complexo com tubercidina (análogo de adenosina) a 1,77 Å. O cristal do mutante Q289L pertence ao grupo espacial $P2_1$, com dimensões de $a = 74,36$ Å, $b = 81,9$ Å, $c = 81,73$ Å e $\gamma = 102,16^\circ$. A estrutura foi resolvida no programa Phaser por substituição molecular, empregando a SmMTAP nativa (PDB 4L5Y) como modelo. O refinamento foi realizado utilizando os programas Phenix e Coot. A estrutura refinada parcialmente encontra-se com $R_{work} = 16.4\%$ e $R_{free} = 19.39\%$. O mutante Q289L da enzima MTAP apresenta o arranjo trimérico muito similar com o da MTAP nativa, indicando que a mutação não interfere no enovelamento da proteína. O sítio ativo de cada monômero está localizado próximo à interface entre as subunidades. Na MTAP nativa, a cadeia lateral do resíduo Q289 interage diretamente com o oxigênio 5' do ligante presente no sítio ativo do monômero vizinho. Como na MTAP humana, o resíduo L289 da SmMTAP mutada não participa na interação com o ligante assim, a presença de uma glutamina na posição 289 da SmMTAP nativa tem sido vista como a causa aparente do aumento na afinidade por adenosina. Ensaios cinéticos com o mutante SmMTAP-Q289L estão sendo conduzidos para confirmar esta hipótese.

Palavras-chave: Fosforilase. MTAP. *Schistosoma mansoni*.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION.WHO. **Schistosomiasis**: fact sheet N°115. 2014. Disponível em:<<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs115/en/UpdateFebruary,2014>>.

Acesso em: 21 ago.2014..

2 SENFT, A. W., SENFTI, D. G.; MIECH, R. P. . Pathways of nucleotide metabolism in *Schistosoma mansoni*. II: disposition of adenosine by whole worms. . **Biochemical Pharmacology**, v. 22, n.4, p. 437-447, 1973.

PG214

Study of PelD mechanism, a protein involved in biofilm formation of *Pseudomonas aeruginosa*

TORRES, N. U.¹; SOUSA, S. S. e¹; MATSUYAMA, B. Y.¹; CHELESKI, J.¹; NICASTRO, G.²; BALDINI, R. L.²; NAVARRO, M. V. de A. S.¹

naiara.utimura@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química - USP

Bacterial response to environmental stimuli can lead to a switch between a planktonic free-swimming life-style to a sessile community of adherent cells embedded within a self-produced matrix of extracellular polysaccharide (EPS), known as biofilm. Formation of bacterial biofilms is usually linked with enhanced resistance against antimicrobial agents found in many chronic and persistent bacterial infections. Central to biofilm formation is a signaling molecule uniquely found in bacteria, guanosine monophosphate (3'-5')-cyclic dimeric (c-di-GMP), which stimulates the production of exopolysaccharide matrix substances in biofilms and inhibits various forms of motility. The major component of the extracellular matrix of the human pathogen *Pseudomonas aeruginosa* PA14 is the PEL polysaccharide. In *Pseudomonas aeruginosa* PA14 a novel class of receptor specific for c-di-GMP has been identified, the transmembrane protein PelD, which contains a GAF and degenerate GGDEF domains in the cytoplasmic portion. Its modulation through this dinucleotide controls the production of PEL by the components of the conserved operon pel and directly influences the ability of biofilm formation. (1) Although structures of the GAF-GGDEF tandem cytoplasmic domains of PelD have been solved and the mode of interaction of c-di-GMP with the RxxD motif of GGDEF was elucidated, little is known about its mechanism of activation. (2-3) In this work, we solved a structure of a different construct of the PelD cytoplasmic domain, which presented an inter-domain reorientation and possibly represents the c-di-GMP active form of PelD. By combining a series of biophysical and functional assays, we propose that the conformational change promoted by c-di-GMP binding to the GGDEF domain is transferred through a juxta-membrane helix to the transmembrane domain of PelD. In order to verify this mechanism, we generated several structure-guided mutants designed to interfere with PelD function and produce c-di-GMP independent activation. Those mutants will complement a pelD deleted strain we already construct (PA14 del pelD) and functional assays will be performed to verify the proposed mechanism. The comparison of biofilm formation and phenotypes of all mutants in this work will help to unveil the regulation mechanism of biofilm formation in *Pseudomonas aeruginosa* that remains unclear.

Keywords: Biofilm. *Pseudomonas aeruginosa*. PelD.

Referências:

1 FRANKLIN, M. J. et al. Biosynthesis of the pseudomonas aeruginosa extracellular polysaccharides, alginate, Pel and Psl. **Frontiers in Microbiology**, v. 2, n. 167, p.1-16, 2011.

2 WHITNEY, J. C. et al. Structure of the cytoplasmic region of PelD, a degenerate diguanylate cyclase receptor that regulates exopolysaccharide production in *Pseudomonas aeruginosa*. **Journal of Biological Chemistry**, v. 287, n. 28, p. 23582-23593, 2012.

3 LI, Z. et al. Structures of the PelD cyclic diguanylate effector involved in pellicle formation in *Pseudomonas aeruginosa* PAO1. **Journal of Biological Chemistry**, v. 287, n. 36, p. 30191-30204, 2012.

PG215

Espectroscopia de correlação de fluorescência (FCS) aplicada em estudos de sistemas moleculares, biológicos e celulares

TSUTAE, F. M.¹; GUIMARÃES, F. E. G.¹

f.tsutae@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A espectroscopia de correlação de fluorescência (FCS) é uma das diferentes técnicas microscópicas de análise de sistemas moleculares isolados em alta resolução espacial e temporal em concentrações extremamente baixas. Nos últimos anos ela tem sido considerada uma poderosa ferramenta capaz de realizar medidas extremamente sensíveis em áreas como bioquímica e biofísica. (1) Como técnica que possui sensibilidade para detecção de uma única molécula ela é utilizada para medir entre outros: concentrações locais de biomoléculas, coeficientes de difusão e constantes cinéticas moleculares. Ela também pode fornecer informação precisa sobre interações moleculares como as que envolvem antígeno-anticorpo, ácidos nucleicos e proteínas. Através de uma combinação de marcadores fluorescentes de alto rendimento quântico, fontes de luz estáveis (lasers), detecção ultrasensível e microscopia confocal é possível realizar medidas de FCS em volumes da ordem de femtolitros e concentrações de nanomolar, em solução aquosa ou em células vivas. (2) O primeiro objetivo do presente trabalho de doutoramento foi implementar a técnica FCS como ferramenta básica de estudo de processos envolvidos com a dinâmica (difusão) e a interação molecular (concentração/localização). Nesta etapa, implementamos as metodologias necessárias para a utilização da técnica de FCS em um microscópio confocal. Esta preparação inicial envolveu estudos e testes com diferentes marcadores moleculares fluorescentes, determinação de diluições e sua padronização na faixa concentrações entre nano e picomolar. Para se obter determinações qualitativas de processos, foram desenvolvidas metodologias e protocolos que eliminassem alterações indevidas desses cromóforos e sistemas moleculares previamente marcados com outros sistemas, como as interações com paredes dos recipientes e efeitos de armazenagem e acondicionamento de biomateriais, sem que os mesmos alterassem as concentrações e morfologias previamente estabelecidas para a detecção quantitativa do FCS. Estes procedimentos foram de fundamental importância para o estabelecimento de condições que garantissem um estudo sistemático em termos de medidas comparativas e reprodutibilidade, bem como as melhores condições para se obter o melhor sinal de FCS. Como resultado desta primeira etapa, estabelecemos o marcador comercial da família ALEXA 488® como padrão de marcador de biomateriais que possui alta eficiência de emissão e elevados valores da função de correlação. Em um segundo estágio deste trabalho, fizemos estudos preliminares que permitissem obter do FCS variações do coeficiente de difusão molecular a partir da variação de parâmetros como, por exemplo, a viscosidade do meio e a conformação molecular de proteínas. Nessa etapa, utilizamos modelos teóricos que melhor ajustassem à curva experimental medida. A experiência adquirida nessas etapas permitiu o estudo da difusão de proteínas marcadas (PUC II e IV) de um meio aquoso (PBS) para o interior de células.

Palavras-chave: Espectroscopia de correlação de fluorescência. Marcadores fluorescentes. Microscopia confocal.

Referências:

1 KRICHEVSKY, O.; BONNET, G. Fluorescence correlation spectroscopy: the technique and its applications. **Reports on Progress in Physics**, v. 65, n. 2, p. 251-297, 2002.

2 SCHWILLE, P.; HAUSTEIN, E. Fluorescence correlation spectroscopy: novel variations of an established technique. **Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure**, v. 36, p. 151-169, 2007. doi: 10.1146/annurev.biophys.36.040306.132612.

PG216

Finite temperature quantum field theory and the Unruh effect

ULIANA, C.¹; VANZELLA, D.¹

uliana@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

In the context of the Unruh Effect one can show that the Minkowski vacuum, which contains no particles according to inertial observers, is a KMS state for uniformly accelerated observers. (1) In particular, the temperature associated with such state is proportional to the observer's acceleration. The KMS property raises the question if it is possible that an accelerated observer could witness a phase transition in an interacting field theory as one reaches the temperature of symmetry restoration present in the conventional finite temperature quantum field theoretical calculation. With respect to such phase transition there is a recent controversy, with one party asserting that the KMS property implies the existence of the phase transition while the other supporting that since the order parameter is a Lorentz scalar one should not observe the said transition. As a first step in furthering this discussion we introduce a finite temperature formalism, namely thermofield dynamics, (2) that parallels the one used in the Unruh Effect. By studying both the similarities and differences between the mathematical structures we hope to gain insight on the nature of the present disagreement, and, at the same time, pave way for an explicit computation in a model field theory.

Keywords: Quantum field theory. Unruh effect. Phase transition.

Referências:

1 UNRUH, W. G.; WEISS, N. Acceleration radiation in interacting field theories. **Physical Review D**, v. 29, n. 8, p. 1656-1662, 1984.

2 DAS, A. **Finite temperature field theory**. Singapore: World Scientific Publishing, 1997.

PG217

Authorship identification using network dynamics

VALENCIA, C. A.¹; AMANCIO, D. R.²; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹

camilo.akimushkin@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemática e da Computação - USP

The macroscopic properties of the written texts have shown to retain the features characteristic of a given language, style or autor. (1-2) While the novel using of networks for text classification has proven useful, (3) the role of network dynamics remains unclear. Autorship identification aims to separate the texts into groups where each group hopefully contains only the texts from the same author allowing to resolve the possible ties. A collection of 302 literary texts from 27 authors was used. For each text considered we construct a series of networks and extract some typical network measures, subsequently classification and clustering methods are applied to the data. Our measures behaved well for most algorithms being especially suitable for the density-based clustering. The distribution of the texts shows that most authors remain bound to non-overlapping regions on such parameter space and while the measures change from text to text this displacement occurs steadily.

Keywords: Authorship identification. Network dynamics. Classification and clustering.

Referências:

1 CHOUDHURY, M.; MUKHERJEE, A. The structure and dynamics of linguistic networks. In: GANGULY, N.; DEUTSCH, A. (Ed.). **Dynamics on and of complex networks**. Boston: Birkhäuser, 2009. p. 145-166.

2 AMANCIO, D. R.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; FONTOURA COSTA, L. Identification of literary movements using complex networks to represent texts. **New Journal of Physics**, v. 14, n. 4, p. 043029, 2012.

3 AMANCIO, D. R. et al. Comparing intermittency and network measurements of words and their dependence on authorship. **New Journal of Physics**, v. 13, n. 12, p. 123024, 2011.

PG218

Optical enhancement in spherical submicromirrors arrays aiming application in OLEDs

VALENTE, G. T.¹; SPADA, E. R.¹; FARIA, R. M.¹; GUIMARAES, F. E. G.¹

gtv@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

It is known that the use of plasmonic structures increases the performance of photovoltaic devices (1) as well as the fluorescence (2) of adsorbed molecules. The aiming of study is to understand the optical enhancement in spherical sub microcavities for that this can be used in organic light emitting diodes (OLEDs). For this we investigated the interaction of laser radiation (visible region) with a periodic network of copper spherical submicrocavities by Confocal Laser Scanning Microscopy (LSCM) and computer simulation. These structures were produced by electrodeposition and nanosphere lithography. A homogenous polyfluorene (PFO) ultrathin film was deposited on the cavities by spin-coating to be used as an emitting layer to probe surface-enhancement fluorescence phenomena. LSCM measurements in reflection mode show an image patterns for a given confocal plane. Similar behavior was observed in photoluminescence intensity of PFO film deposited on this structure. The PFO emission in the cavity enhances by a factor 7 in comparison with the reference film deposited on flat surfaces. The profile of reflection intensity can be explained by composing reflection process in a spherical metallic cavity and collection of the light by the confocal microscope. Simulations of the image patterns based on geometrical optical approach were carried out by considering the spherical submicrocavities like ideal spherical mirrors. The simulated results reproduce consistently the behavior of the emitted and reflected image patterns along the submicrocavities obtained experimentally. These results demonstrate that copper sub-microcavities act like spherical sub-micromirrors. In addition, effects of fluorescence quenching via energy transfer processes to copper plasmons states are not observed and that emission enhancement can be associated to interference processes involving the incident and reflected emitted by the mirror. We acknowledge support from INEO, CNPQ, FAPESP.

Keywords: Spherical submicromirrors. Luminescence enhancement. OLEDs.

Referências:

- 1 HEO, M. et al. High-performance organic optoelectronic devices enhanced by surface plasmon resonance. **Advanced Materials**, v. 23, n. 47, p. 5689-5693, 2011.
- 2 JOSE, B. et al. Emission enhancement within gold spherical nanocavity arrays. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 11, n. 46, p. 10923-10933, 2009.

PG219

Computação quântica adiabática usando Qubits supercondutores

VARGAS, J. A.¹; BRITO, F.¹

juanvagra@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - SP

A computação quântica adiabática (CQA) foi proposta como um método para resolver problemas de otimização NP-difícil. (1) Este esquema de computação possui como base fundamental o teorema adiabático que, para evoluções de tempo finito, determina a relação entre a fidelidade da operação lógica e o tempo do processamento de informação, que estão por sua vez ligados pelo comportamento do gap de energia (por ex. a diferença de energia associada entre estado excitado e fundamental), o qual sempre tende a diminuir rapidamente com o aumento de recursos (bits quânticos: qubits) usados na computação. Por outro lado, atualmente têm-se como foco encontrar qubits físicos cada vez com melhores características que consigam proporcionar um computador quântico de ótima eficiência, e uma das alternativas mais promissoras seriam os qubits supercondutores.(2) Na procura de exemplos de sistemas de matéria condensada que permitam minimizar a tendência de redução exponencial do gap mínimo, temos focado, inicialmente, no efeito de frustração o qual se apresenta como forte candidato para alcançar este objetivo. Com este intuito, têm-se estudado o comportamento do gap de diversas arquiteturas variando: i) o número de qubits, ii) o número de conectividades, e iii) a proporção entre os parâmetros de acoplamento. Para complementar este estudo, abordaremos outros candidatos para tentar evitar essa redução exponencial do gap mínimo, explorando sistemas que apresentem transições de fase de segunda ordem ou superiores (3), e considerando desordem no sistema, por fim, pretendemos analisar qual é o papel que faz o emaranhamento na CQA usando qubits baseados em dispositivos supercondutores.

Palavras-chave: Qubits supercondutores. Computação quântica adiabática. Frustração.

Referências:

1 FARHI, J. E. et al. **Quantum computation by adiabatic evolution**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/quant-ph/0001106>>. Acesso em: 21 ago.2014.

2 CLARKE, J.; WILHELM, F. K. Superconducting quantum bits. **Nature** v.453.p.1031-1042, 2008.doi:10.1038/nature07128.

3 SCHUTZHOLD, R.; SCHALLER, G. . Adiabatic quantum algorithms as quantum phase transitions: first versus second order. **Physical Review A**, v. 74, p.060304, 2006.doi: 10.1103/PhysRevA.74.060304.

PG220

Build and test of 2D MOT source for Na atoms: comparison with the Zeeman slower case

VIVANCO, F. A. J.¹; PEÑAFIEL, E. E. P.¹; KRUGER, A. L.¹; FARIAS, K. M.¹; BAGNATO, V. S.¹

franklin@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In recent times compact systems in cold atoms experiments are gaining prominence. (1) We present a comparison between two different sources of sodium atoms for load a magneto-optical trap (3D-MOT). The first one is a compact source of cold sodium atoms that use a magnetic field produced by permanent magnets that allows to simultaneously realize a longitudinal Zeeman slower and a trap field for two-dimensional MOT (2D MOT). (2) The total light power used for performed the 2D MOT is approximately 0.5 W of yellow light (589 nm), included the 2D Zeeman slower beam. For performed the 2D MOT we used a steel chamber with a high vacuum (10^{-8} Torr) and a sodium oven in 210 Celsius degrees with the sodium atoms exit for upward. We achieve 2×10^{10} atoms when a push beam is turn-on, and an atomic flux with more than 1×10^{10} atoms/s that load the 3D-MOT. The second one is a more conventional that comes from a oven in 300 Celsius degrees that ejects atoms passing through a Zeeman slower machine before reach the 3D-MOT chamber. (3) The total light power used in this configuration is 120 mW, but we need used 20 Amperes additionally for creates the magnetic field for the Zeeman decelerator. In the best conditions we have 3.5×10^{10} atoms in 3D chamber with a mean flux of 5×10^9 atoms/s. The 3D MOT is used for the characterization of each source. A detail comparison of parameters involved is shown in a table.

Keywords: Magneto optical trap. 2D MOT. Zeeman slower.

Referências:

- 1 TIECKE, T. G. et al. High-flux two-dimensional magneto-optical trap source for cold lithium atoms. **Physical Review A**, v. 80, n. 1, p. 013409-1-013409-12, 2009.
- 2 LAMPORESI, G. et al. A compact high-flux source of cold sodium atoms. **Review of Scientific Instruments**, v. 84, n. 6, p. 063102-1-063102-7, 2013.
- 3 NAIK, D. **Bose-Einstein condensation: building the testbeds to study superfluidity**. 2006. 212 p. Ph. D. Thesis (Physics) - School of Physics, Georgia Institute of Technology, Atlanta, 2006.

PG221

Modelagem de grãos confinados em invólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem

VRECH, G.¹; COSTA, L. F.¹

gvrech@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Materiais Granulares são conjuntos de partículas discretas, cujos tamanhos e formas variam enormemente, como areia, grãos ou mesmo asteróides num cinturão. Esse tipo de estrutura possui um comportamento coletivo distinto de um sólido único, um líquido ou gás, e esse comportamento não é dedutível apenas do comportamento individual das partículas componentes. A formação dos arcos, estruturas que promovem a anisotropia de forças num sistema, acontece corriqueiramente dentro de materiais granulares, prejudicando o fluxo de partículas. (1) O presente trabalho modela os arcos a partir de uma rede complexa, (2) sendo grãos os nós e forças as ligações utilizando sua topologia para estudar a anisotropia inerente às forças que compõe o sistema. Para tal foram realizados ensaios tomográficos (3) de protótipos contendo diversos tipos de grãos. Cada ensaio foi reconstruído tridimensionalmente, atribuindo de modo automático os nós e ligações da rede. A propriedade strength foi capaz de apontar os nós candidatos a arcos. Devido ao grande tamanho computacional dos dados é necessário desenvolver técnicas para repetir o procedimento com dados não redimensionados, proporcionando precisão mais adequada para o cálculo dos componentes básicos da rede: os nós e as ligações.

Palavras-chave: Redes complexas. Redes de força. Tomografia computadorizada.

Referências:

1 ZURIGUEL, I. et al. Jamming during the discharge of grains from a silo described as a percolating transition. **Physical Review E**, v. 68, n. 3, p. 030301, 2003.

2 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **SIAM Review**, v. 45, n. 2, p. 167-256, 2003.

3 PETROVIC, A. M.; SIEBERT, J. E.; RIEKE P .E. Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomographic scanning. **Soil Science Society of America Journal**, v. 46, n. 3, p. 445-450, 1982. doi:10.2136/sssaj1982.03615995004600030001x.

PG222

Imagem de fluorescência aplicada em doenças de citros

WETTERICH, C. B.¹; MARCASSA, L. G.¹

caiovtrich@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos últimos anos, tem havido um crescente interesse na detecção precoce das doenças que afetam as culturas agrícolas a fim de evitar grandes perdas econômicas devido à contaminação de novas plantas. As principais doenças cítricas, cancro cítrico e greening, são uma séria ameaça à produção de citros em todo o mundo, incluindo regiões do Brasil e dos Estados Unidos. A disseminação rápida das doenças leva à redução do número de pomares cultivados, resultando em danos econômicos aos produtores e às indústrias relacionadas. (1) O desenvolvimento de métodos para o diagnóstico precoce pode resultar em uma importante ferramenta para o controle e gestão dos citros. (2) Algumas deficiências nutricionais como a de ferro e zinco apresentam sintomas visuais semelhantes com o greening, enquanto que o cancro cítrico pode ser confundido com a verrugose ou leprose dos citros, podendo levar ao diagnóstico incorreto. No presente trabalho, a espectroscopia por imagens de fluorescência em conjunto com a técnica de aprendizado supervisionado, SVM, foram utilizados a fim de identificar e discriminar as principais doenças que afetam os citros. As amostras em estudo são cancro cítrico, verrugose, greening, e deficiência de zinco. O objetivo principal é discriminar as doenças com sintomas visuais semelhantes, no caso, cancro cítrico de verrugose, e greening de deficiência de zinco. Os resultados mostram que é possível utilizar estas duas técnicas em conjunto para discriminar as doenças que apresentam sintomas visuais semelhantes. Como perspectiva futura para este trabalho, pretendemos aprimorar o parâmetro especificidade, ou até mesmo a precisão da técnica empregada, usufruindo de softwares avançados de análise estatística.

Palavras-chave: Doenças cítricas . Imagens de fluorescência. SVM.

Referências:

1 WETTERICH, C. B.et al. A comparative study on application of computer vision and fluorescence imaging spectroscopy technique for detection of citrus Huanlongbing disease in USA and Brazil. **Journal of Spectroscopy**,, v. 2013, p. 1-6, 2013.

2 SANKARAN, S.; MISHRA, A.; EHSANI, R.; DAVIS, C. . A review of advanced techniques for detecting plant diseases. **Computers and Electronics in Agriculture**, v.72, n.1, p. 1-13, 2010.

PG223

Multilayer ultrafine properties obtained by spin-coating layer-by-layer

ZAGO, L. A.¹; GUIMARAES, F. E. G.¹

leandro.zago@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The development of organic light emitting brings with it a number of advantages over its predecessors, such as flexibility, rapid decomposition in nature and low power consumption. Thus this research is to investigate the phenomenon of depletion of the pi electrons in ultrathin polymer layers (1), for this we will use the AS-LbL technique (Spin Self-Assemble Layer-by-Layer) and three polymer poly (9,9 dioctilfluoreno) (PFO), poly (tetraidrotiofeno of xililideno chloride) (PTHT) and dodecyl benzene sulfonate (DBS), using films with thicknesses of approximately 3 nm in a substrate grown quartz crystal, we can observe the change the properties optical and electrical in the interface, and thus use it for a variety of devices. The PFO exhibits a well-defined absorbance with the maximum at 390 nm (the blue band) that is related to the pi-conjugated band, but by depositing a layer of PTHT this characteristic virtually disappears. At principle will be investigated the variation of the absorbance of this material, with immediate utility in the application of devices to exchange their coloration, as camouflage, traffic lights and general coatings.

Keywords: Spin-coating layer-by-layer. Organic light-emitting diode. Pi-conjugated band.

Referências:

1 VALE, M. M. . **Dinâmica excitônica em estruturas poliméricas multicamadas**. 2014. 109p. Tese (Doutorado em Ciências e Engenharia de Materiais) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

PG224

Transporte de carga através de ponto quântico correlacionado: uma abordagem por teoria do funcional da densidade

ZAWADZKI, K.¹; OLIVEIRA, L. N.¹

krissia.zawadzki@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) permitiu uma série de avanços no entendimento da estrutura de sólidos e moléculas, bem como no cálculo de suas propriedades. (1) Partindo do teorema de Hohenberg-Kohn, (1) o qual mostra que o estado fundamental Ψ_{GS} é um funcional único da densidade $n(\vec{r})$ do sistema, o formalismo da DFT é construído de modo que todos os observáveis associados a Ψ_{GS} podem ser facilmente computados desde que o funcional $n(\vec{r})$ seja conhecido. Na prática, modelar um sistema de muitos corpos via DFT requer o desenvolvimento de funcionais convenientes (usualmente baseados em aproximações) e de métodos computacionais robustos. Um dos desafios pouco explorados por trabalhos em funcionais da densidade diz respeito ao problema de elétrons fortemente correlacionados, tal como um sistema no qual o acoplamento entre um momento magnético e elétrons de condução da banda metálica manifesta-se na forma do chamado *efeito Kondo*. (2) Recentemente, a descoberta e o controle do efeito Kondo em dispositivos nanoscópicos, como o *transistor de um elétron* (SET), (2) ampliaram o interesse de grupos experimentais em explorar esses sistemas como campo de prova de resultados teóricos, desafiando, assim, o formalismo dos modelos construídos para computar propriedades de transporte em nanoestruturas. Manipulando o SET através de uma diferença de potencial entre as extremidades esquerda e direita, é possível confinar elétrons em seu interior e, assim, formar um ponto quântico. Uma descrição inicial desse processo via *ansatz* de Bethe foi proposta por Bergfield, porém a aproximação utilizada parece restrita demais. (3) Nessa perspectiva, o transistor apresenta-se como um problema em potencial para o desenvolvimento de ferramentas de DFT dependente do tempo. O presente projeto pretende estudar a evolução temporal das propriedades desse sistema quando um excesso de carga é criado no extremo esquerdo e acompanhar seu deslocamento através do dispositivo. Um procedimento para realizar este cálculo consiste em construir o funcional da densidade associado $E_U[\bar{n}_d, \bar{n}]$, onde \bar{n}_d e \bar{n} denotam as densidades de carga no ponto quântico e no dispositivo e, assim, diagonalizar autoconsistentemente o Hamiltoniano de Kohn e Sham H_U que representa quanticamente o SET. (1) Em nossa abordagem, vamos tratar o problema inicialmente na aproximação de Bergfield (3) e depois desenvolver cálculos do grupo de renormalização numérico (NRG) para obter uma expressão mais precisa para o funcional $E_U[\bar{n}_d, \bar{n}]$. Acreditamos que este projeto possa lançar luz sobre várias facetas obscuras do problema do transistor de um elétron, bem como contribuir para o desenvolvimento de funcionais, aproximações e métodos numéricos aplicáveis a outros problemas de estado sólido.

Palavras-chave: Pontos quânticos. Teoria do funcional da densidade . Transistor de um elétron.

Referências:

1 CAPELLE, K.; CAMPO JUNIOR, V. L. Density functionals and model Hamiltonians: pillars of

many-particle physics. **Physics Reports**, v. 528, n. 3, p. 91-159, 2013. doi: 10.1016/j.physrep.2013.03.002.

2 GROBIS, M.; RAU, I. G.; POTOK, R. M.; SHTRIKMAN, H.; GOLDHABER-GORDON, D. Universal scaling in nonequilibrium transport through a single channel kondo dot. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 24, p. 246601. doi: 10.1103/PhysRevLett.100.246601.

3 BERGFELD, J.P.; LIU, Z.-F.; BURKE, K.; STAFFORD, C.A. Bethe Ansatz approach to the kondo effect within density-functional theory. **Physical Review Letters**, v. 1008, n. 6, p. 066801, 2012. doi: 10.1103/PhysRevLett.108.066801.

Índice de Autores

A	
AGUIR, K.	183
ALCARAZ, F. C.	148
ALMEIDA FILHO, F. P.	31
ALMEIDA FILHO, H. A.	88
ALMEIDA, G. F. B.	89, 398
ALVES, A. B.	205
AMANCIO, D. R.	406
AMARANTE, A. M.	90
AMORIM, A. D. F.	131
AMORIM, D. R. .B.	92
ANDRADE, C. T.	93
ANDREETA, M. B.	95
ANDRICOPULO, A. D.	192, 229, 241, 296, 342, 380, 381
ANDRICOPULO, R. K.	296
AOKI, P. H. B.	89
ARAÚJO, A. P. U.	66, 82, 207, 237, 263, 265
ARAÚJO, G. D.	96
ARAUJO, E. A.	97
ARAUJO, F. L.	99
ARAUJO, H. S.	101
ARGENTIN, M. N.	102
ASCONA, C. R.	104
ASSAF, E. M.	165
AURICHIO, V. H.	105
AVACA-CRUSCA, J. S.	207
AZEVEDO, E. C.	32, 106
AZEVEDO, E. R.	86, 125, 365
B	
BACHEGA, J. F. R.	231, 385
BACHELARD, R.	245
BAFFA FILHO, O.	93
BAGNATO, G. G.	107
BAGNATO, V. S. ..	63, 81, 84, 93, 109, 117, 136, 152, 159, 162, 195, 198, 219, 252, 284, 298, 316, 323, 326, 345, 357, 374, 387, 391, 394, 409
BAHRAMI, A.	109, 198, 391
BALDINI, R. L.	401
BALLESTEROS, C. A. S.	111
BARBANO, E. C.	112, 256
BARBOSA, , P. C.	32
BARBOSA, U.	113
BARDIVIESSO, L. G.	115
BARRETO, D. L.	117

BARROS, K. L. P. de	118
BARROS, M. A.	44
BARROS, M. V.	44
BARUFFI, M. D.	214
BASTOS, C. M. O.	119
BATISTA, R. F. M.	120
BELLINI, N. K.	122
BERGOC, I. C.	124
BERNARDES, A.	61, 268
BERNARDES, E. S.	43
BERNARDI, J. C.	133, 154
BERNARDI, M. I. B.	60, 165
BERNARDI, M. R.	33
BERNARDINELLI, O. D.	125
BERTOLINO, D. E.	35
BESSE, R.	36
BEZERRA, D. M.	321
BIRAL, E. J. P.	127
BIRD, L.	327
BONAGAMBA, T. J.	95, 104, 131, 259, 261, 285, 306
BORALLI, C. M. S.	38
BOSSOLAN, N. R. S.	41, 102, 115
BOTELHO, M. B. S.	31
BRAGA, R.	129
BRAMORSKI, C.	82
BRAMORSKI, C. B.	39
BRANDÃO NETO, J.	327, 399
BRATIFICH, R.	130
BRAZ, D. C.	131
BRAZACA, L. C.	39, 82, 133
BRITO, F.	161, 408
BRUNO, O. M.	210, 287
BUENO, R. V.	134, 231
BUZZÁ, H. H.	84, 136
C	
CÂMARA, A. S.	79
CAFACE, R. A.	138
CAIRES, F. R.	139
CAMÂRA, A. S.	140
CAMARGO, A. S. S.	31
CAMARGO, I. L. B. C.	277, 339
CAMILLO, C. M.	201
CAMILO, C.	311
CAMILO, C. M.	146, 315
CAMPANA FILHO, S. P.	319
CAMPELO, R.	40

CAMPOS, C. P.	47, 142
CAMPOS, T.	119, 144
CANDIDO, D. R.	145
CAPUTI, A. A.	205
CARACANHAS, M. A.	159, 374
CARDOSO, A. R.	146
CARDOSO, M. R.	89
CARVAJAL JARA, D. A.	148
CARVALHO JUNIOR, P. S.	46
CARVALHO NETO, J. T.	104
CARVALHO, C. M.	150
CARVALHO, K. F.	41
CARVALHO, M. M.	42
CASSAGO, A.	106
CASTILHO, P.	298
CASTILHO, P. C. M.	152
CASTRO NETO, J. C. de	282
CAVALCANTE, N.	153
CENTURION, L. M. P. C.	154
CEZAR, H. M.	156
CHAVES, A. S.	157
CHAVIGURI, J. R. H.	159
CHELESKI, J.	401
CHERUBIM, C.	161
CIDRIM, A.	162
COELHO, F. B.	163, 382
COLETTA, V. C.	165
COLNAGO, L. A.	261
COLNAGO, N. A..S.	51
COMIN, C. H.	166
CONCEIÇÃO, R.	308
CONSALTER, D.	167
CONSALTER, D. M.	233
CONSOLE, F. C. C.	43
CONSTANTINO; C. J. L.	89
CORÁ, E.	150
CORDEIRO, A. M.	51
CORRÊA, T.	102
CORREA, T.	41
CORREIA, T. F. de A.	44
CORRER, W.	168
COSTA FILHO, A. J. da	214
COSTA, L. da F.	363
COSTA, L. F.	166, 410
COSTA; L. da F.	89
COSTALONGA, M.	46
COURTEILLE, Ph. W.	245, 267

COUTINHO, D. J.	169
CRUZ, A. R.	171
CUCCHIERI, A.	71, 105
CUNHA, G. P.	172
CUNHA, J. V. S.	174
CURVELO, A. A. S.	86
D	
D'EURYDICE, M. N.	285
D'ALMEIDA, C. P.	47, 274
D'EURYDICE, M. N.	259
DA SILVA, C. C. P.	175
DA SILVA, J. L. F.	36
da SILVA, M. T. A.	74
DE BONI, L.	194
DE CASTRO, L. A.	177
DE GROOTE, M. C. R.	140, 178
DE MARCO, R.	48
DEAZEVEDO, E. R.	113
deAZEVEDO, E. R.	172
DEBONI, L.	383
DeMARCO, R.	289
DESSOY, M. A.	296
DIAS, D. M.	163
DIAS, L. C.	296
DIAS, P. G.	252
DIPOLD, J.	179
DJURADO, D.	336
DOMENEGUETI, J. F. M.	181, 283
DONATTI, D. A.	67
DONOSO, J. P.	367
DORO NETO, C.	182
E	
EGUES, J. C.	145, 171
ELLENA, J.	175
ELLENA, J. A.	46, 75, 395
ESCANHOELA JÚNIOR, C. A.	183
ESCOBAR, A.	316
ESPIRITO SANTO, M. C.	86
ESPIRITO SANTO, T. S. do	185
EVANGELISTA, D. E.	186
F	
FABBRI, R.	188
FARIA JUNIOR, P. E.	119, 144
FARIA, G. C.	172
FARIA, H. A. M.	189

FARIA, R. M.	92, 169, 185, 407
FARIAS, K. M.	152, 298, 409
FARRO, E. G. S.	190
FELIZATTI, A. P.	48
FERNANDES, A. F.	50
FERNANDES, L. G.	51
FERRARI, C. R.	31
FERREIRA JÚNIOR, J. R.	247
FERREIRA JÚNIOR, J. R. S.	385
FERREIRA, F.	191
FERREIRA, L. L. G.	192
FERREIRA, R. S.	296
FIGUEIREDO, E. B.	150
FIORAVANTI, C. M.	192
FONSECA, R. R.	194
FONTANARI, J. F.	127
FONTOURA COSTA, L. da	182
FONTOURA DA COSTA, L.	345
FORTULAN, C. A.	259
FORTUNATO, T. C.	195, 316
FRANCA, E. F.	90
FREIRE, R. L. H.	196
FREITAS, L. C. G.	90
FREITAS, M. G.	82
FRITSCH, A.	109
FRITSCH, A. R.	198, 391
G	
GARCÍA, P. G.	204
GARCIA RIVERA, V. A.	370
GARCIA, C. R. S.	231
GARNIER, C.	150
GARRATT, R. C.	153, 216, 221, 247, 385
GERALDE, M. C.	219
GETELINA, J. C. A.	200
GODOY, A.	311
GODOY, A. S.	201
GOMES JUNIOR, F. G.	233
GOMES, J. A. C.	202
GOMEZ, E. C.	203
GONÇALVES, M. P.	82
GOVONE, A. B.	204
GOZZI, G.	67
GRAEBIN, C. S.	229
GRECCO, C.	303
GUARIENTO, R. T.	205
GUIDO, R. C.	310

GUIDO, R. V. C.	35, 134, 224, 231, 280, 324
GUIMARÃES, F. E. G.	86, 99, 138, 185, 403, 407, 412
GUTIERREZ, R. F.	82, 207
H	
HARRINGTON, K.	112
HEEL, M. van	350
HENN, E. A. L.	77, 109, 198, 391
HENRIQUE, F. R.	209
HERINGER, O.	82
HERNANDES, A. C.	60, 68, 321
HOLANDA, G.	326
HORJALES, E.	79, 140, 178, 291
HOYOS NETO, J. A.	200
I	
IERICH, J. C. M.	90
INADA, N. M.	219, 357, 389
J	
JANA, B.	342
JANEGITZ, B. C.	133, 318, 338
JESUS, T. C. L.	82
JI, P.	300
JORGE, A. E. S.	142
JUSTO, M. J. M.	210
K	
KADOWAKI, M.	311
KIEJNA, A.	196
KREBS, M.	306
KRUGER, A.	298
KRUGER, A. L.	409
KUBOTA, T. M. K.	212
KUMAGAI, P. S.	214
KUNDLATSCH, G. E.	82
KURACHI, C. . 63, 81, 84, 93, 136, 142, 195, 204, 219, 274, 288, 303, 323, 331, 345, 348, 357, 387, 389	
KURTHS, J.	300
L	
LA SCALA JUNIOR, N.	150
LANG, R. G.	52
LANZONI, P.	216
LAPORTE, R. S.	218
LEITE, A. E. T.	54
LEITE, F. L.	90
LEITE, I. S.	219
LELIMOUSIN, M.	154

LEONARDO, D. A.	221
LEVIN, D. B.	396
LICIO, J. G.	55
LIMA JUNIOR, J. J. D.	89
LIMA, A. L.	222
LIMA, G. M. A.	35, 224
LIMA, M. A.	125
LIMA, M. Z. T.	226
LIMA, R. B. B.	228
LIMA, T. S.	57, 359
LINDENBERG, F. M.	82
LOPES, J. L.	289
LOURENÇO, A. B.	55, 68
 M	
MACEDO, J. N.	221
MACEDO, J. N. A.	66, 237, 263, 289
MAFUD, A. C.	69
MAGALHÃES, A. B.	212, 312
MAGALHÃES, D. V.	252, 326
MAGALHAES, L. G.	229
MAGON, C. J.	261, 367
MAIA, L. P.	42
MAIZEL, A. S.	82
MALUF, F. V.	134, 231
MANZINE, L. R.	50
MARANGONI, V. S.	54, 318, 389
MARASSI, A. G.	233
MARCASSA, L. G.	411
MARCOMINI, J.	234
MARCOS, F. C. F.	165
MAREGA JUNIOR, E.	130, 370, 377
MARKUS, R. P.	39
MARQUES, F. B.	229
MARQUES, M. R. H.	235
MARTINELLI, T.	58
MARTINEZ, O. B.	88
MARTINS, C. S.	237
MARTINS, M.	167
MARTINS, M. J.	163, 233, 382
MARTINS, N. Z.	60
MASCARENHAS, Y. P.	51, 69
MASCHIO, E. H. M.	239
MASTELARO, V. R.	118, 165, 183
MATIAS, P.	240, 354
MATOS, K. S.	241
MATSUYAMA, B. Y.	243, 401

MAXIMO, C. E.	245
MEDEIROS, A. I.	219
MEDEIROS, P.	82
MELLO, B. L.	246
MENCK, P. J.	300
MENDES, T.	255, 352
MENDONÇA, C. R.	89, 194, 209, 398
MENDONÇA, D. C.	61
MENDOZA, E.	247
MENEGHELLO, R.	248
MENEZES, L. P.	249
MENEZES, P. F. C.	316, 323
MERCADO, W. R.	251
MERCADO-GUTIERREZ, E. D.	252
MESQUISTA, N. C. M. R.	253
MIGLORIA, A.	255
MIGUEZ, M. L.	256
MIKUNI, V. M.	62
MILORI, D. M. B. P.	150, 212, 312
MIRANDA, P. B.	276, 319, 340
MISOGUTI, L.	33, 112, 202, 256
MODA, T. L.	241
MONSALVE, M. A. E.	258
MONTALVÃO, R. W.	139, 356, 373
MONTRAZI, E. T.	259, 261
MORAES, J. B.	82
MORAES, T. B.	261
MORAIS, S. T. do B.	263
MORCOS, F.	342
MOREIRA, B. C.	82
MOREIRA, H. H. T. M.	265
MORIYA, P. H.	267
MORIYAMA, L. T.	195, 284, 303
MOSQUEIRO, T. S.	42, 205
MOUNIER, S.	150
MOUSSA, M. H. Y.	101, 124, 129, 203, 239, 251, 279, 334, 372, 375, 393
MULINARI, E. J.	268
MULLER, S.	326
MUNIZ, H. S.	270
MUNIZ, J. R. C.	61, 226, 258, 268
N	
NALIN, M.	367
NAPOLITANO, R. J.	177
NARDI, A. B.	316
NARDI, L. M. C.	272
NASCIMENTO, A. S.	174, 190, 270, 295

NASCIMENTO, O. R.	65, 336
NATORI, W. M. H.	273
NAVARRO, M. V. A. S.	146, 243, 248, 332, 361, 401
NAVARRO, M. V. S. A.	253
NAVASCUES, F. F.	63
NETTLESHIP, J.	327
NICASTRO, G.	401
NOGUEIRA, A. R. S.	86
NOGUEIRA, F. G. E.	165
NOGUEIRA, M. S.	274, 303
NOGUEIRA, P. F. M.	64
NOGUEIRA, V. H. R.	64, 82, 338
NONATO, M. C.	214
NUNES, F.	82
O	
OITICICA, P. R. A.	276
OKADO, J. B.	277
OLIANI, F. H.	65
OLIVA, G.	231, 296
OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	90, 188, 379, 406
OLIVEIRA NETO, F.	279
OLIVEIRA, A. A.	280
OLIVEIRA, A. O.	282
OLIVEIRA, A. R.	283
OLIVEIRA, B. P.	284
OLIVEIRA, E. L.	285
OLIVEIRA, G. S.	90
OLIVEIRA, H. M.	93
OLIVEIRA, I. M.	287
OLIVEIRA, L. N.	62, 272, 314, 335, 413
OLIVEIRA, M. L. B.	105
ONO, B.	82
ONO, B. A.	288
ONUCHIC, J. N.	342
ORCIA, D.	48, 289
OTUKA, A. J. G.	398
OWENS, R.	327
P	
PAIVA, F.	167, 306
PAIVA, F. F.	57, 235, 249, 292, 359
PALMA FILHO, N. B.	66
PALOMINO SALCEDO, D. L.	291
PAOLILLO, F. R.	323
PASCHOAL, A. M.	292
PATRICIO, M. A. T.	294
PAULA, K. de	295

PAULI, I.	296
PAVONI, J. F.	93
PEÑAFIEL, E. E. P.	409
PEÑAFIEL, E. P.	298
PEDROZO-PENAFIEL, E.	152
PELLEGRINI, V. O. A.	299
PEREIRA, H. M.	327, 399
PEREIRA, R. G.	73, 273, 377
PERON, T. K. D. M.	300
PESSOA, P. H. M.	82
PIMENTA, M.	308
PINTO, D. O. S.	341
PINTO, R. D.	205
PIRES, D. P.	301
PIRES, L.	93, 303
PIZETTA, D. C.	163, 305, 382
POLI, R. S.	306
POLIKARPOV, I.	86, 97, 125, 186, 201, 226, 246, 299, 311, 315, 396
PORTUGAL, R. V.	106, 350
POVEDA-CUEVAS, F. J.	252
PRADO, R. R.	308
PRATAVIEIRA, S.	47, 63, 274, 303, 331
PRON, A.	336
PUSEP, Y. A.	294
Q	
QUADROS, M. H.	67
QUEIROZ, G. E. T.	310
R	
RADICCHI, G. R.	40
RAMIA, M. P.	311
RANULFI, A. C.	312
REDDIVARI, Y.	327
REGO, C. R. C.	314
REIS, C. V.	315
REQUENA, M. B.	316, 323
REZENDE, C. A.	125
RIBEIRO, A. S. L.	68
RIBOVSKI, L.	82, 318
RIMOLI, C. V.	319
ROATI, G.	152, 298
ROCHA, R. W.	316
RODRIGUES, C. A.	89
RODRIGUES, F. A.	72, 300
RODRIGUES, J. E. F. S.	321
RODRIGUES, P. G. S.	323
RODRIGUES, V. K. T.	324

RODRIGUEZ, A.	326
ROMANELLO, L.	327
RONDINA, G. G.	156
RONQUI, J. R. F.	329
ROSA e SILVA, I.	38, 76
ROSA, R. G.I T.	331
ROSSETO, F. R.	332
ROSSETTI, R. F.	334
RUBIO, T. I.	69
RUGGIERO, C. A.	191, 354
S	
SABINO, F. P.	36, 335
SALES, A. I. L.	296
SALINA, A. C. G.	219
SALVIO, A. G.	387
SALVIO. G.	345
SAMPAIO, T. S.	296
SANDVIG, K.	265
SANTA ROSA, W.	321
SANTANA, V. T.	336
SANTI, N. S. M.	71
SANTOS JR, C. D.	82
SANTOS, E. R.	72
SANTOS, F. A.	64, 318, 338
SANTOS, F. E. A.	117, 162, 394
SANTOS, J.	339
SANTOS, J. C. C.	340
SANTOS, M. L.	341
SANTOS, R. N.	342
SANTOS, T. M.	343
SBRISSA, D.	345
SCADUTO, L. C. N.	282
SCHOSSLER, M. O.	73
SCORTECCI, J. F.	74
SEGATO, F.	268
SEGURA, C. O.	347
SEKIMOTO, L. S. A.	348
SENRA, T. D. A.	319
SERRÃO, V. H. B.	50
SERRAO, V. H. B.	74, 350
SERRONE, W. M.	352
SHIOZAKI, R. F.	267
SILVA JUNIOR, J. T.	354
SILVA NETO, A. M. da	356
SILVA, A. P.	357, 389
SILVA, C. C.	96, 120, 218

SILVA, D. M. D. D.	57, 382
SILVA, D. M. D. D. da	359
SILVA, E. E. D.	361
SILVA, F. N.	363
SILVA, I. A.	365
SILVA, I. D. A.	367
SILVA, I. R.	74, 82, 122, 368
SILVA, J. L. F.	156, 157, 196, 335
SILVA, L. F.	183
SILVA, M. T. A.	38, 76, 122, 222, 368
SILVA, O. B.	370
SILVA, R. M.	372
SILVA, S. R.	373
SILVA, J. L. F. da	314
SIPAHI, G. M.	119, 144
SIQUEIRA JUNIOR, J. R.	379
SIQUEIRA, R. F.	367
SLAETS, J. F. W.	240
SLAFER, B.	296
SMAIRA, A. F.	374
SOARES, P. M. S. B.	375
SOARES-PINTO, D. O.	228, 301, 347, 365
SOBREIRA, F. W. A.	377
SOBRINHO, D. G.	157
SOLER, T. de O.	75
SOUSA, M. A. M.	379
SOUSA, S. S. e	401
SOUZA, A.	306
SOUZA, A. S.	380
SOUZA, G. E.	76
SOUZA, J. R. T.	327
SOUZA, M. L.	296, 381
SOUZA, P. V. B. D.	382
SOUZA, T. G. B.	383
SOUZA, V.	52, 179, 234, 308
SPADA, E. R.	407
SPARLING, R.	396
STELMASTCHUK, L. B. F.	385
STOTT, M.	396
STRINGASCI, M. D.	387
SUZUKI, I. L.	389
T	
TANNÚS, A.	163, 167, 233, 305, 306, 382
TANOUYE, F. T.	82
TAVARES, P.	109
TAVARES, P. E. S.	198, 391

TEIZEN, V. F.	393
TELES, R. P.	394
TELLES, G.	109
TELLES, G. D.	198, 391
TENORIO, J. C.	395
TERESHCHUK, P.	196, 314
THIEMANN, O. H.	32, 38, 50, 74, 76, 106, 122, 222, 343, 350, 368
TIRAPELLI, L. F.	93
TOMAZINI JUNIOR, A.	396
TOMAZIO, N. B.	398
TONIN, Y.	109
TONIN, Y. R.	77, 198, 391
TORINI, J. R.	399
TORRES, N. U.	401
TRAVERS, J. P.	336
TRAVIESO, G.	107, 191, 329, 345
TREVISAN, M.	82
TSUTAE, F. M.	403
 U	
ULIANA, C.	405
 V	
VALENCIA, C. A.	406
VALENTE, G. T.	407
VANZELLA, D.	405
VARGAS, J. A.	408
VEIGA, P. A. F.	58
VERNEK, E.	171
VICENTE, F. S.	67
VIDOTO, L. G.	382
VIDOTO, E.	167
VIDOTO, E. L. G.	131, 163, 233, 306
VIEIRA, D.	82
VILLAS, P. R.	212
VISCARDI, L. A. M.	79
VIVANCO, F. A. J.	409
VIVANCO, F. J.	152, 298
VIVAS, M. G.	194
VRECH, G.	410
 W	
WALMSLEY, L.	336
WATTS, A.	214
WEIS, P. T.	63, 81, 316
WESTH, P.	299
WETTERICH, C. B.	411
WU, R.	82

Z	
ZAGO, L.	44
ZAGO, L. A.	412
ZAMPRONIO, D. K.	82
ZANE FILHO, L.	82
ZANELLI, C. F.	82
ZANGIROLAMI, A. C.	84, 136
ZAWADZKI, K.	413
ZILIO, S. C.	112, 181, 256, 283
ZUCOLOTTO, V.	39, 54, 64, 111, 133, 154, 168, 189, 318, 338, 389
ZUTIC, I.	144



SIFSC 4, 06 a 09 de outubro 2014, São Carlos-SP

SIFSC.IFSC.USP.BR

PATROCÍNIO:

KASVI **analítica** **THORLABS**



sartorius

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

APOIO:



IFSC20 ANOS

IFSC
JUNIOR

USP 80
1934 2014

SBIifsc

CIBFar



CEPOF
CENTRO DE PESQUISAS EM ÓPTICA E FOTÔNICA



Eletrobras
Eletronuclear