



Instituto de Física de São Carlos
Universidade de São Paulo
Av. Trabalhador São-carlense, 400
São Carlos - SP



GRADUAÇÃO E PÓS



Semana Integrada do
Instituto de Física de São Carlos

de 16 a 19
de outubro de 2012

+MINICURSOS

+EMPRESAS

PALESTRAS

EVENTOS
CULTURAIS

WORKSHOP
I.C. e PÓS

COFFEE-BREAK

EXPOSIÇÕES

COQUETEL

Livro de Resumos

Resumos dos Workshops de
Graduação e Pós-Graduação da
II Semana Integrada do
Instituto de Física de São Carlos

Universidade de São Paulo

University of São Paulo

Instituto de Física de São Carlos

Institute of Physics of São Carlos

II Semana Integrada do IFSC

II Integrated Week of IFSC

SIFSC

16 a 19 de outubro de 2012

São Carlos, SP - Brasil

Livro de Resumos

Abstract Book

São Carlos

2012

Universidade de São Paulo

Reitor	Prof. Dr. João Grandino Rodas
Vice-Reitor	Prof. Dr. Helio Nogueira da Cruz

Instituto de Física de São Carlos

Diretor	Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandez
Vice-Diretor	Prof. Dr. Osvaldo Novaes de Oliveira Junior

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado
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 do IFSC = Integrated Week of IFSC.(2. : 16 - 19
out. : 2012: São Carlos, SP.)

Livro de resumos = Abstract book/Organizado por
Ivan R. Silva [et al]. São Carlos: IFSC, 2012.
386p.

Texto em português e inglês.

1. Física. I. Silva, Ivan R. e. II. Prado, Raul R. III Pizetta,
Daniel C. IV Pires, Layla V. Buzzá, Hilde H. VI. Silva, Cintia M.
P. VII. Título.

CDD 530

ISBN - 978-85-61958-02-2



II SEMANA INTEGRADA DA FÍSICA

II Integrated Week of the Institute of IFSC

Coordenadores

Coordinators

Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandez

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

Director of the Institute of Physics of São Carlos – University of São Paulo

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

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

President of Graduate Comission of the Institute of Physics of São Carlos – University of São Paulo

Comissão Organizadora

Organizing Committee

Ana Carolina Mafud

Cíntia Maira Pereira da Silva

Daniel Cosmo Pizetta

Gustavo Santos Schimiti

Hernan Franco Romera Fazzio

Hilde Harb Buzzá

Ivan Rosa e Silva

Layla Pires

Jose Ricardo Furlan Ronqui

Larissa Satiko A. Sekimoto

Marcelo Saito Nogueira

Milena Menezes Carvalho

Patrícia Monteiro

Rafael Bruno Barbosa Lima

Raul Ribeiro Prado



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

Avaliadores SIFSC

SIFSC Evaluators

Prof. Dr. Alberto Tannus
Prof. Dr. Alessandro Silva Nascimento
Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta
Prof. Dr. Atílio Cucchieri
Prof. Dr. Bernhard Joachim Mokross
Prof. Dr. Carlos Alberto de Simone
Profa. Dra. Cibelle Celestino Silva
Profa. Dra. Claudia Elisabeth Munte
Prof. Dr. Cláudio José Magon
Profa. Dra. Cristina Kurachi
Prof. Dr. Daniel Augusto Turolla Vanzella
Prof. Dr. Eduardo Horjales Reboredo
Prof. Dr. Eduardo Ribeiro de Azevêdo
Prof. Dr. Euclydes Marega Junior
Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araujo
Profa. Dra. Andrea S. S. de C. A. Bernardez
Prof. Dr. Francisco E. Gontijo Guimaraes
Prof. Dr. Frederico Brito
Prof. Dr. Gonzalo Travieso
Prof. Dr. Hellmut Eckert
Prof. Dr. Iouri Poussep
Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto
Prof. Dr. Jose Carlos Egues de Menezes
Prof. Dr. Jose Fabian Schneider
Prof. Dr. Jose Pedro Donoso Gonzalez
Profa. Dra. Leila Maria Beltramini
Prof. Dr. Leonardo Paulo Maia
Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior
Prof. Dr. Lino Misoguti
Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa
Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa
Prof. Dr. Marcos Vicente de A. S. Navarro
Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa
Profa. Dra. Nelma Regina Segnini Bossolan
Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann
Prof. Dr. Paulo Barbeitas Miranda
Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano
Prof. Dr. Ricardo De Marco
Prof. Dr. Roberto Mendonça Faria
Prof. Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira
Prof. Dr. Sergio Carlos Zilio
Prof. Dr. Tito Jose Bonagamba
Prof. Dr. Tomaz Catunda

Prof. Dr. Valmor Roberto Mastelaro
Prof. Dr. Valtencir Zucolotto
Prof. Dr. Valter Luiz Líbero
Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas

Dr. Alessandro Cosci
Dra. Amanda Luizetto dos Santos
Dra. Ana Carolina Mafud Landgraff
Dra. Ana Isabela Lopes Sales
Dr. Bruno Campos Janegitz
Dr. Cesar Moisés Camilo
Dr. Diogo de Oliveira Soares Pinto
Dr. Edgar Aparecido Sanches
Dra. Edna Regina Spada
Dr. Ednilson Orestes
Dr. Edson Crusca Junior
Dr. Edson Giuliani Ramos Fernandes
Dr. Edson Luiz Gea Vidoto
Dra. Fabiana Diuk de Andrade
Dr. Fabio Aparecido Ferri
Dr. Fábio Henrique Dyszy
Dra. Fernanda Costa
Dra. Fernanda Rossi Paolillo
Dr. Fernando Paiva
Dr. Gustavo D. Telles
Dr. Helton José Wiggers
Dra. Herica Ricci Donato
Dr. Humberto Muniz Pereira
Dra. Izaltina Silva Jardim Cavalli
Dr. Jefferson Esquina Tsuchida
Dr. João Renato Carvalho Muniz
Dra. Joci Neuby Alves Macedo
Dr. Jonathas de Paula Siqueira
Dr. José Dirceu Vollet Filho
Dra. Juliana Cancino Bernardi
Dra. Juliana Cheleski
Dra. Juliana Coatrini Soares
Dra. Juliana Sposto Avaca Crusca
Dr. Julio Cesar Pissuti Damalio
Dra. Kilvia Mayre Farias
Dra. Lilian Tan Moriyama
Dra. Livia Manzini
Dra. Lucinéia Ferreira Ceridório



Dr. Luis Fernando Reyes
Dr. Luiz Gustavo E. Arruda
Dra. Marciana Uliana
Dr. Marco Antonio Seiki Kadowaki
Dr. Marco Túlio Alves da Silva
Dra. Mariana Torres Carvalho
Dr. Mateus José Martins
Dr. Matheus Postigo
Dra. Natalia Mayumi Inada
Dr. Nirton Cristi Silva Vieira

Dra. Patricia Monteiro
Dra. Paula Cristina Rodrigues
Dr. Reginaldo Massanobu Kuroshu
Dra. Renata Krogh Andricopulo
Dr. Romain Pierre Marcel Bachelard
Dr. Sergio Ricardo Muniz
Dra. Stella Lorres Muller
Dra. Teresa Cristina Leandro de Jesus
Dr. Yashashchandra Dwivedi



Agradecimentos

Acknowledgements

Diretoria do IFSC-USP

Direction of IFSC-USP

Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandes – diretor

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior – vice-diretor

Maria Helena Braga de Carvalho – secretária

Mariana Rodrigues – secretária

Serviço de Pós Graduação

Graduation Service

Silvio César Athayde

Ricardo Vital do Prado

Patrícia Giannini Ferreira

Serviço de Graduação

Undergraduation Service

Isabel Aparecida Possatto de Oliveira

Edvane Mariza Vicentini Cavallaro

Ana Glaucia Fiscarelli

Serviço de Biblioteca e Informação Prof. Bernhard Gross

Library and Information Service Prof. Bernhard Gross

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Helena Di Francisco

Natalina O Ribeiro Ziemath

Célia Maria D Martins

Gracielli Batista Pepe Cardoso

Tania Ortin de Almeida

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa A Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Luciana A B Martinez

Vilma Del Grossi Coutinho



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

Seção de Gráfica

Printing section

Aurotides Celestino Vieira
Cristovão de Souza Santos
Denise Aparecida Aiello Portella
Ítalo Carlos Celestini

Apoio

Sponsors



PRÓ-REITORIA DE
CULTURA E EXTENSÃO
UNIVERSITÁRIA

SBI ifsc



Carta do Diretor

A Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos (SIFSC) chega a sua 2ª edição com programação científica de alto nível e diversificada, atendendo às expectativas da comunidade do IFSC, que é de natureza intrínseca inter e multidisciplinar. Este evento tem característica de formação profissional complementar relevante para os estudantes de graduação e de pós-graduação, pois permite que participem e aprendam a coordenar e gerenciar um evento relativamente grande em número de participantes. Em 2012 esperam-se 750 participantes, tendo sido registrados até o momento 600 alunos, 350 de graduação e 250 de pós-graduação.

O trabalho em equipe certamente engrandecerá a vida profissional dos envolvidos na Comissão Organizadora, pois são diversas tarefas a serem realizadas de maneira integrada. Essas incluem definir palestras e cursos, convidar pesquisadores externos, auxiliar na captação de recursos e divulgação, definir página na Internet, layout de cartazes, trabalhar com fornecedores e nosso pessoal técnico-administrativo, além de supervisionar o andamento das atividades durante a II SIFSC.

É importante destacar, também, que a Semana será de intensas atividades científicas, incluindo palestras e cursos, e atividades culturais. Isso permitirá maior integração entre nossa comunidade, que tem crescido e se internacionalizado a cada ano. Destacam-se a palestra de divulgação à comunidade são-carlense “Surpresas do Mundo Quântico”, as apresentações de teatro e o workshop com empresas de base tecnológica.

Os participantes de graduação e pós-graduação com apresentação de trabalhos decorrentes de suas pesquisas concorrerão ao Prêmio “Yvonne Primerano Mascarenhas”, criado por iniciativa da diretoria do IFSC em 2011 para valorizar trabalhos de alto nível. Os Prêmios consistem num estágio em laboratório no exterior por até 3 meses, incluindo despesas de transporte e uma bolsa de 1200 euros ou 1500 dólares americanos por mês. Em 2012 serão entregues 4 Prêmios, 2 para os alunos de Iniciação Científica e 2 para os pós-graduandos (1 mestrado e 1 doutorado).

Não poderia deixar de fazer vários agradecimentos, em especial à Comissão Organizadora, uma equipe extremamente profissional com que tive a honra de compartilhar momentos agradáveis, e aos docentes e servidores não docentes do IFSC pelo apoio ao evento. Agradeço, também, às Comissões de Graduação, de Pós-Graduação, de Pesquisa e de Cultura e Extensão do IFSC, e às Pró-Reitorias de Graduação, de Pós-Graduação e de Pesquisa, Cultura e Extensão da Universidade de São Paulo, pelo apoio na divulgação, no processo de avaliação dos trabalhos de pesquisa e por aportar parte dos recursos financeiros necessários para a execução desse grande evento.

Em nome do Prof. Osvaldo Novais de Oliveira Junior, vice-diretor do IFSC, do Prof. Francisco Castilho Alcaraz, chefe do Departamento de Física e Ciência dos Materiais, do Prof. José Fernando Fontanari, chefe do Departamento de Física e Informática, e de todos os membros da Congregação do IFSC, agradeço a todos os pesquisadores convidados por abrilhantarem nossa II SIFSC, e à comunidade do IFSC e USP São Carlos pela participação expressiva no evento. A todos, o meu mais sincero, muito obrigado!



Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandez
Diretor IFSC – USP



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

Letter from the Director

The Second Week of the São Carlos Institute of Physics (SIFSC) includes a high-level, diversified scientific program to cater for the inter- and multidisciplinary nature of our Institute. This event is aimed at complementing the professional training of our undergraduate and graduate students, as they have the opportunity to take part and organize a relatively large meeting. The number of attendees should reach 750 in 2012, with 600 already registered, 350 of which are undergraduate students.

The team work of the Organizing Committee will certainly enrich their professional experience, for a number of tasks need to be performed in an integrated fashion. These include the choice of lectures and courses, invitation of external speakers, help in obtaining financial resources and in the advertisement of the meeting, design of a webpage and flyers, and work with companies and administrative staff from IFSC to perform these tasks, in addition to supervising the development of the II SIFSC activities.

It should also be emphasized that the Meeting will be busy in terms of scientific and cultural activities, which will be important for integration of our community that has grown and has been internationalized in recent years. Highlights will include a lecture entitled "Surprises of the Quantum World", open to the whole of the São Carlos City community, theatre plays and a workshop with high tech industries.

The graduate and graduate students presenting their scientific work will compete for the Yvonne Primerano Mascarenhas Award, created in 2011. The Award consists in a fully-paid visit (up to 3 months) in a top international research group, which includes the air fares and a stipend of 1,200 euros or 1,500 American dollars per month. In 2012, 4 students will receive the Award: two undergraduate and two graduate students (one MSc. and another PhD).

I take this opportunity to thank many people involved in the II SIFSC. Special thanks are due to the Organizing Committee, a highly professional team with whom I had the privilege to work, and to all the teaching and non-teaching staff of IFSC for their support. I also thank the IFSC Committees for Undergraduate Studies, for Graduate Studies, for Research and for Culture and Extension, and the USP Prorectorates for Undergraduate Studies, for Graduate Studies, for Research and for Culture and Extension, for their help in advertising the event, in the evaluation of the scientific presentations and for the partial financing of the II SIFSC.

On behalf of Prof. Osvaldo N. Oliveira Jr, vice-director of IFSC, Prof. Francisco C. Alcaraz, Head of the Physics and Materials Science Department, of Prof. José F. Fontanari, Head of the Physics and Informatics Department, and of all members of the IFSC Council, I thank the invited speakers for their special contribution to the II SIFSC, and the IFSC and USP-São Carlos communities for taking part in this important event. With my sincere thanks,



Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandez
Diretor IFSC – USP



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

Apresentação do Workshop de Iniciação Científica

O Workshop de Iniciação Científica que será realizado pela segunda vez durante a II Semana do IFSC tem como objetivo divulgar os trabalhos de pesquisa realizados pelos alunos dos cursos de Bacharelado e Licenciatura do IFSC através da exposição de pôsteres. Os trabalhos a serem apresentados pelos alunos de graduação refletem a pesquisa multi e interdisciplinar realizada no IFSC envolvendo temas das áreas de física, química, biologia, bioquímica, computação, ensino de física e matemática. Além de divulgarem seus trabalhos de pesquisa, os alunos de graduação do IFSC terão a oportunidade de interagir com pesquisadores do IFSC e de outras instituições que estarão presentes no evento ministrando palestras ou avaliando os trabalhos apresentados. Além disso, é importante destacar a possibilidade de interação com alunos de Pós-Graduação e de poder tomar conhecimento das múltiplas possibilidades de realização de trabalhos de pesquisa no IFSC após o termino de seu curso. Finalmente, os diferentes Minicursos e Palestras que serão apresentados durante o evento certamente irão enriquecer a formação dos alunos de graduação e poderão abrir novas possibilidades de pesquisa na suas futuras carreiras.



Prof. Dr. Valmor R. Mastelaro
Presidente da Comissão de Graduação do IFSC



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

Apresentação do Workshop de Pós Graduação

O Workshop da Pós-graduação do Instituto de Física de São Carlos é parte integral e fundamental do programa de pós-graduação em Física do IFSC/USP que se encontra em sua segunda edição no formato conjunto com o Workshop de Iniciação Científica e organizado pelos próprios alunos da instituição e realizado ao final do segundo semestre letivo de cada ano.

A estrutura do Workshop visa a livre troca de experiências entre alunos, docentes e técnicos incentivando a discussão dos trabalhos científicos de mestrado e doutorado que estão sendo desenvolvidos pelos nossos alunos. A realização conjunta do Workshop da Pós-Graduação e do Workshop de Iniciação Científica ampliou a interação incluindo a participação importante dos alunos de graduação nas trocas de experiências e interesses. O resultado evidente é a divulgação das atividades realizadas nas diferentes áreas de concentração (Física Básica e Aplicada, Física Computacional e Biomolecular) que caracterizam nosso programa de pós-graduação e a nossa instituição, a qual possui um forte caráter multi e interdisciplinar ímpar no cenário científico nacional.

Este evento portanto se tornou uma vitrine importante de nossa instituição para fomentar a interação entre alunos, docentes e técnicos assim como servir de mecanismo para apresentar a sociedade o que esta sendo desenvolvido no IFSC.



Prof. Dr. Otavio H. Thiemann
Presidente da Comissão de Pós-Graduação



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

Sumário

Workshop de Iniciação Científica

IC1 -

Otimização de potenciais empíricos para nanopartículas de metais de transição utilizando dados ab-initio

AGE, Paulo Rogerio Pereira S; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira..... 49

IC2 -

Enzima seril-tRNA sintetase de Trypanosoma brucei sob análise molecular

EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti; BELLINI, Natália Karla; THIEMANN, Otavio Henrique 50

IC3 -

Investigação do equilíbrio monômero-dímero da canacistatina-1 por ressonância magnética nuclear de alta resolução

CAVINI, Italo Augusto; GARRATT, Richard Charles; SILVA, Flávio Henrique; KALBITZER, Hans Robert; MUNTE, Claudia Elisabeth..... 51

IC4 -

Expressão e purificação de um complexo de septinas

CUNHA, João Victor de Souza; MACEDO, Joci Neuby Alves 53

IC5 -

Análise quantitativa de nanopartículas poliméricas a partir do uso da difração de raios X pelo método do pó.

DA SILVA, Geisiane Rosa; DOS SANTOS, Amanda Luizetto; SANCHES, Edgar Aparecido; MASCARENHAS, Yvonne Primerano 54

IC6 -

Desenvolvimento da óptica de telescópios para experimentos de astrofísica de partículas

DIPOLD, Jessica; SOUZA, Vitor de 55

IC7 -

Desenvolvimento de ferramentas computacionais para a análise da distribuição da luz na terapia fotodinâmica

FORTUNATO, Thereza Cury; STRINGASCI, Mirian Denise; FERREIRA, Dilleys; KURACHI, Cristina; BAGNATO, Vanderlei Salvador 56

IC8 -**Definição de novas variáveis temporais para o estudo de codificação em pequenas redes neurais**

GUARIENTO, Rafael Tuma; BROCHINI, Ludmila; PINTO, Reynaldo Daniel..... 57

IC9 -**Configuração do arranjo de telescópios de luz Cherenkov para o CTA**

LANG, Rodrigo Guedes; SOUZA, Vitor de 58

IC10 -**Síntese e processamento de cerâmicas $ZrTiO_4$ aplicadas em sensores de umidade**

LIMA, Raquel de Castro Rodrigues; BONACIN, Rafael; BERNARDI, Maria Inês Basso ... 59

IC11 -**Um estudo da transferência atômica entre duas armadilhas magneto-ópticas em um sistema de condensação de Bose-Einstein**

MARINO, Áttis Vinícius Martines; TELLES, Gustavo Deczka; BAGNATO, Vanderlei Salvador 60

IC12 -**Evolução temporal do contraste em diferentes regiões cerebrais em imagens obtidas utilizando MEMRI**

MARQUES, Márcia Renata Hidalgo; MALHEIROS, Jackeline Moraes; PAIVA, Fernando Fernandes 61

IC13 -**Efeito da suplementação de selenito de sódio em culturas de trypanosoma cruzi**

MORAES, Alan Raphael de Farias Klein; PORTAPILLA, Gisele Bulhões; DA SILVA, Marco Tulio Alves; THIEMANN, Otavio Henrique 63

IC14 -**Desenvolvimento de sensores para monitoramento de microrganismos**

NOGUEIRA, Marcelo Saito; KURACHI, Cristina 65

IC15 -**Emprego da terapia fotodinâmica na descontaminação bucal**

PARMESANO, Thiago Nogueira; LIZARELLI, Rosane de Fátima Zanirato; BAGNATO, Vanderlei Salvador 67

IC16 -**Caracterização de estado sólido do cocrystal de oxalato de dietilcarbamazina**

PEPINO, Rebeka de Oliveira; SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da; ELLENA, Javier Alcides 68

IC17 -**Modelo teórico para dose limiar e profundidade de necrose em terapia fotodinâmica com fonte de espectro amplo**

REQUENA, Michelle Barreto; PRATAVIEIRA, Sebastião; VOLLET-FILHO, José Dirceu; BAGNATO, Vanderlei Salvador 70

IC18 -**Síntese e dinâmica espectral de nanofilmes poliméricos com diferentes arquiteturas de band gap**

RIMOLI, Caio Vaz; MIRANDA, Paulo Barbeitas 72

IC19 -**Avaliação de teor de carbono de solos utilizando a técnica LIBS**

ROMANO, Renan Arnon; VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira; SANTOS, Cleber Hilário dos 74

IC20 -**Introdução a teoria quântica de campos e efeitos não lineares em fluidos quânticos**

SANTOS, Millena Logrado dos; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves 76

IC21 -**Clonagem, expressão e estudos estruturais do domínio GTPase de septinas de Schistosoma mansoni**

SANTOS, Yuri Volpato; ZERAIK, Ana Eliza; DE MARCO, Ricardo 77

IC22 -**Clonagem, expressão e purificação de diguanilato ciclases bacterianas para estudos estruturais e desenvolvimento de inibidores**

SILVA, Everton Edésio Dinis; WIGGERS, Helton José; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles 79

IC23 -**Diferença do efeito vascular em terapia fotodinâmica usando diferentes fotossensibilizadores**

SILVA, Lucas Vale da; BUZZA, Hilde Harb; KURACHI, Cristina; BAGNATO, Vanderlei Salvador 80

IC24 -**Produção de potenciais ópticos dinâmicos e arbitrários para o estudo de gases quânticos aprisionados**

SILVA, Paulo Cesar Ventura da; , Sérgio Ricardo 81

IC25 - Aprisionamento de gases quânticos unidimensionais

SMAIRA, André de Freitas; CARACANHAS, Mônica Andrioli; BAGNATO, Vanderlei Salvador 82

IC26 - Expressão e estudos estruturais do domínio GTPase da septina CrSept SOUZA, Anacleto Silva de; ARAUJO, Ana Paula Ulian; PINTO, Andressa Patricia Alves; MUNTE, Claudia Elisabeth.....	83
IC27 - O aspecto geométrico da dinâmica de uma partícula SOUZA, Iberê Oliveira Kuntz de; ONNIS, Irene Ignazia	85
IC28 - Clonagem, purificação e cristalização da septina humana: SEPT3 TANOUYE, Fernando Takeshi; MACEDO, Joci Neuby Alves; ARAUJO, Ana Paula Ulian	86
IC29 - Produção heteróloga das fosfodiesterases c-di-GMP específicas da família HD-GYP de Pseudomonas aeruginosa e Xanthomonas axonopidis TORRES, Naiara Utimura; CHELESKI, Juliana; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles.....	88

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Utilização de laser de femtossegundo na microestruturação de silício amorfo hidrogenado ALMEIDA, Gustavo Foresto Brito de; CARDOSO, Marcos Roberto; CONSTANTINO, Carlos José Leopoldo; AOKI, Pedro Henrique Benites; RODRIGUES, Carlos Alberto; LIMA JUNIOR, José Jorge Dantas de; COSTA, Luciano da Fontoura; MENDONÇA, Cleber Renato	93
PG2 - Instrumentação computacional integrada em tempo real para experimentos com o duto óptico da mosca ALMEIDA, Lirio Onofre Baptista de; SLAETS, Jan Frans Willem	94
PG3 - Medida de observável de correlações quânticas ALMEIDA-SILVA, Isabela; SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico; AUCCAISE, Ruben; OLIVEIRA, Ivan; SARTHOUR, Roberto; BONAGAMBA, Tito José; GIROLAMI, Davide; ADESSO, Gerardo; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro; SOARES-PINTO, Diogo	95

PG4 -

Avaliação da capacidade antimetastática de análogos guanidínicos sintéticos: triagem biológica e identificação do alvo molecular

ALTEI, Wanessa Fernanda; VALLI, Marília; SANTOS, Ricardo Nascimento dos; REGASINI, Luis Octavio; BOLZANI, Vanderlan da Silva; ANDRICOPULO, Adriano Defini... 97

PG5 -

Identificação de movimentos literários usando redes complexas

AMANCIO, Diego Raphael; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de; COSTA, Luciano da Fontoura 99

PG6 -

Permissividade elétrica e perda dielétrica de cerâmicas multicamadas de

$BaTi_{(1-x)}Zr_xO_3$

AMARAL, Thiago Martins; GUALBERTO, Alan Rodrigo Marinho; ANTONELLI, Eduardo; HERNANDES, Antonio Carlos 100

PG7 -

Estudo da alteração da fluorescência da protoporfirina IX para aplicações em diagnóstico

ANDRADE, Cintia Teles de; PRATAVIEIRA, Sebastião; VOLLET-FILHO, José Dirceu; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina 101

PG8 -

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

ANDREETA, Mariane Barsi; BONAGAMBA, Tito José 103

PG9 -

Propagação intergaláctica de núcleos com novo modelo de radiação cósmica de fundo em infravermelho

ANJOS, Rita de Cassia dos; SOUZA, Vitor de 104

PG10 -

Criação e manipulação de estados comprimidos de spin nuclear

ARAUJO-FERREIRA, Arthur Gustavo; BONAGAMBA, Tito José; AUCCAISE, Ruben.... 105

PG11 -

Estudo da entropia como metodologia para reconhecimento de padrões

ASSIRATI, Lucas; BRUNO, Odemir Martinez 106

PG12 -

Deformações no modelo de Bullough-Dodd

AURICHIO, Vinicius Henrique; FERREIRA, Luiz Agostinho; FOSTER, David 107

PG13 -**Fabricação de micro-ambientes para a investigação de crescimento celular utilizando polimerização via absorção de dois fótons**

AVILA, Oriana Ines; MENDONÇA, Cleber Renato; FONTANA, Carla Raquel 109

PG14 -**Estrutura cristalográfica da hemoglobina de *Glossoscolex paulistus*, um complexo de 3,6 milhões de daltons**

BACHEGA, José Fernando Ruggiero; MALUF, Fernando Vasconcelos; HORJALES, Eduardo; GARRATT, Richard Charles 110

PG15 -**Evidência de uma lei de potências no espectro de energia cinética de uma nuvem atômica turbulenta**

BAGNATO, Guilherme de Guzzi; TELLES, Gustavo Deczka; CARACANHAS, Mônica Andrioli; SANTOS, Ednilson; MUNIZ, Sérgio Ricardo; BAGNATO, Vanderlei Salvador ... 112

PG16 -**Nanopartículas $Fe_3O_4@Au$ e aplicações em nanomedicina**

BALLESTEROS, Camilo; ZUCOLOTTI, Valtencir 113

PG17 -**Cultivo e isolamento de bactérias anaeróbias termofílicas de reservatório de petróleo, com interesse para espécies da ordem Thermotogales**

BARDIVIESSO, Leandro Godoi; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini; MARTINS, Julia Mara; VOLPON, Antonia Garcia Torres 114

PG18 -**Estudos espectroscópicos, termodinâmicos e computacionais da interação de dois peptídeos de fusão da glicoproteína Spike do SARS-CoV com modelos de membranas**

BASSO, Luís Guilherme Mansor; MENDES, Luís Felipe; FERNANDES, Tácio Vinício Amorim; PASCUTTI, Pedro Geraldo; COSTA FILHO, Antonio José da 116

PG19 -**Determinação de parâmetros de massa efetiva em semicondutores III-V a partir de simulações ab initio.**

BASTOS, Carlos Maciel de Oliveira; SIPAHI, Guilherme Matos 118

PG20 -**Dinâmica de opinião de Hegselmann-Krause**

BATISTA, João Luiz Bunoro; COSTA, Luciano da Fontoura 119

PG21 -**Mobilidade da hélice 12 de receptores nucleares: comparação entre simulações de dinâmica molecular e experimentos de anisotropia de fluorescência**

BATISTA, Mariana Raquel Bunoro; MARTINEZ, Leandro..... 120

PG22 -**Desenvolvimento de estímulos dinâmicos térmicos para análise do sistema sensorial infravermelho em serpentes**

BATISTA, Renata da Fonseca Moraes; SLAETS, Jan Frans Willem 122

PG23 -**Estudos estruturais do hPPAR α LBD em complexo com ligantes naturais**

BERNARDES, Amanda; MUNIZ, João Renato Carvalho; POLIKARPOV, Igor 123

PG24 -**Técnicas de RMN de estado sólido em biomassas submetidas a pré-tratamentos específicos**

BERNARDINELLI, Oigres Daniel; LIMA, Marisa Aparecida de; REZENDE, Camila Alves de; POLIKARPOV, Igor; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro 124

PG25 -**Síntese e caracterização de AgNPs conjugadas com peptídeos antimicrobianos**

BERTÉ, Rodrigo; LEITE, José Roberto de Souza de Almeida; ZUCOLOTTI, Valtencir.. 125

PG26 -**Correlação entre propriedades varistoras e microestruturais em eletrocerâmicas de Ba_{1-x}Er_xTiO₃**

BONACIN, Rafael; BERNARDI, Maria Inês Basso; M'PEKO, Jean Claude 126

PG27 -**Correlação entre propriedades espectroscópicas e a estrutura do complexo de Eu(III):[tBu-COO]3Eu**

BOTELHO, Moema de Barros e Silva; GALVEZ-LOPEZ, Maria Dolores; ALBUQUERQUE, Rodrigo Queiroz; CAMARGO, Andrea Simone Stucchi de 127

PG28 -**Desenvolvimento de MOUSE de RMN para aplicação em ciência do petróleo e dos materiais**

BRAZ, Daniel Cesar; D'EURYDICE, Marcel Nogueira; SILVA, Rodrigo de Oliveira; AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de; VIDOTO, Edson Luiz Gea; BONAGAMBA, Tito José 128

PG29 -**Avaliação da terapia fotodinâmica em um modelo tumoral tridimensional**

BUZZA, Hilde Harb; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina 129

PG30 -**Colisões envolvendo estados de Rydberg nD+nD numa armadilha de dipolo**

CABRAL, Jader de Souza; KONDO, Jorge Douglas Massayuki; GONÇALVES, Luis Felipe; MARCASSA, Luis Gustavo 130

PG31 -**Propriedades ópticas da fase β do polímero PFO**

CAFACE, Raphael Antonio; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo 131

PG32 -**Simulação de uma estrutura core-shell de AlAs/GaAs**

CAMPOS, Tiago de; FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de; SIPAHI, Guilherme Matos 132

PG33 -**Estados de borda em sistemas com múltiplos domínios de massa**

CANDIDO, Denis Ricardo; EGUES, José Carlos 133

PG34 -**Expansão anômala e condensados mistos**

CARACANHAS, Mônica Andrioli; SMAIRA, André de Freitas; BAGNATO, Vanderlei Salvador 134

PG35 -**Mapeamento global de interações proteicas nas vias de sinalização mediadas por c-di-GMP de *Pseudomonas aeruginosa* e *Xanthomonas axonopodis***

CARDOSO, Andrea Rodrigues; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles 135

PG36 -**Características locais no tráfego de pacotes em redes complexas próximo ao ponto de congestionamento**

CARUSO, Jeremihas Sulzbacher; TRAVIESO, Gonzalo 137

PG37 -**Estados quasi-estacionários e invariância conforme**

CARVAJAL JARA, Diego Alejandro; ALCARAZ, Francisco Castilho 138

PG38 -**Caracterização no estado sólido de fármacos antidepressivos: planejamento de novas formas cristalinas**

CARVALHO JUNIOR, Paulo de Sousa; ELLENA, Javier Alcides 140

PG39 -**Avaliação do potencial de sequestro e emissão de CO_2 na cultura de cana-de-açúcar segundo diferentes manejos do solo**

CARVALHO, Camila Miranda; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira; LA SCALLA JÚNIOR, Newton; FIGUEIREDO, Eduardo Barretto; FERREIRA, Edilene 142

PG40 -**Aplicações das nanopartículas no tratamento e diagnóstico do câncer**

CARVALHO, Carina Miranda; ZUCOLOTTI, Valtencir 144

PG41 -**Grafos e redes complexas em análise de imagens e visão computacional**

CASANOVA, Dalcimar; BRUNO, Odemir Martinez 145

PG42 -**Imagem por contraste de fase e transferência parcial e imagem por absorção**

CASTELO BRANCO, Cora; MUNIZ, Sérgio Ricardo..... 147

PG43 -**Análises termodinâmicas de um condensado aprisionado: caracterização do sistema experimental**

CASTILHO, Patrícia Christina Marques; POVEDA-CUEVAS, Freddy Jackson; MUNIZ, Sérgio Ricardo; MAREGA JUNIOR, Euclydes; BAGNATO, Vanderlei Salvador..... 148

PG44 -**Estudos de sistemas alostéricos através de métodos de simulação computacional**

CÂMARA, Amanda Souza; HORJALES, Eduardo 150

PG45 -**Modelo de rede prediz resíduos de aminoácidos importantes para difusão de calor em Xilanases GH11**

CENSONI, Luciano; MARTINEZ, Leandro..... 152

PG46 -**Caracterização de nanocompósitos de nanotubos de carbono e poli(amidoamina) e aplicação em biossensores**

CENTURION, Lilian Maria Pessoa da Cruz; CANCINO, Juliana; ZUCOLOTTTO, Valtencir..... 154

PG47 -**Estrutura atômica de clusters de Pt, Cu e ligas de PtCu: uma investigação através da teoria do funcional da densidade**

CHAVES, Anderson Silva; PIOTROWSKI, Maurício Jeomar; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira 156

PG48 -**Caracterização funcional da septina de Chlamydomonas reinhardtii**

CIOL, Heloisa; ARAUJO, Ana Paula Ulian..... 158

PG49 -**Engenharia de cristais aplicada ao preparo de sais de haletos de Lamivudina.**

CLAVIJO, Juan Carlos Tenorio; ELLENA, Javier Alcides..... 159

PG50 -**Aproximação analítica para simulações dos efeitos de movimentos moleculares em sinais de RMN de separação de campo local**

COBO, Márcio Fernando; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro 160

PG51 -**Estudo de pré-tratamentos da biomassa e da interação enzimática por meio de técnicas espectroscópicas e de microscopia óptica de alta resolução**

COLETTA, Vitor Carlos; CONCEIÇÃO, Fernando Rodrigues da; REZENDE, Camila Alves de; POLIKARPOV, Igor; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo 162

PG52 -**Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares**

COMIN, Cesar Henrique; COSTA, Luciano da Fontoura 163

PG53 -**Caracterização de gêneros musicais por redes complexas**

CORRÊA, Débora Cristina; COSTA, Luciano da Fontoura 164

PG54 -**Síntese de um módulo de comunicação Ethernet em hardware digital para transferência de dados em três velocidades**

CORRÊA, Rodrigo Rafael Melaré; MARTINS, Mateus José; TANNÚS, Alberto 166

PG55 -**Células fotovoltaicas híbridas: arquiteturas baseadas em efeitos fotônicos e plasmônicos**

COUTINHO, Douglas José; FARIA, Roberto Mendonça 168

PG56 -**MRSA ST5-SCCmecII e sua SLV ST105-SCCmecII demonstram caráter endêmico em hospital de Belo Horizonte**

DABUL, Andrei Nicoli Gebieluca; CORSI, Waldomiro Thiago; BOGNI, Simoni Camila; MARCELLO JUNIOR, Hylo Baeta; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha 169

PG57 -**Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida**

DE CASTRO, Leonardo Andreta; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus 170

PG58 -**Evolução temporal da robustez e modularidade de redes ósseas**

DORO NETO, Carlos; COSTA, Luciano da Fontoura 171

PG59 -**Síntese e caracterização do sistema do $\text{La}_{(0,02)}\text{Sr}_{(0,98)}\text{Ti}_{(x)}\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 15$, % mol) utilizando o método dos precursores poliméricos.**

ESCANHOELA JUNIOR, Carlos Augusto; BERNARDI, Maria Inês Basso; MASTELARO, Valmor Roberto 172

PG60 -**Transformada wavelet aplicada na extração das características do ruído emitido pela caneta ao assinar**

ESCOLA, João Paulo Lemos; GUIDO, Rodrigo Capobianco..... 173

PG61 -**Otimização de estratégias de pré-tratamento de diferentes biomassas lignocelulósicas e suas utilizações na produção de etanol de segunda geração via hidrólise enzimática**

ESPIRITO SANTO, Melissa Cristina; POLIKARPOV, Igor; SANTOS, Maria Auxiliadora Morim; LIMA, Marisa Aparecida de; NOGUEIRA, Andrea Regina dos Santos; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro 174

PG62 -**Caracterização molecular e estrutural da selenoproteína T (SelT) de Trypanosoma brucei**

EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti; BELLINI, Natália Karla; THIEMANN, Otavio Henrique 176

PG63 -**Estruturas cristalográficas da selenofosfato sintetase de Trypanosoma brucei e Leishmania major**

FAIM, Livia Maria; SILVA, Ivan Rosa e; PEREIRA, Humberto D'Muniz; DIAS, Marcio Vinicius Bertacine; THIEMANN, Otavio Henrique..... 177

PG64 -**Spin-órbita em semicondutores wurtzita: uma análise da banda de condução**

FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de; SIPAHI, Guilherme Matos 179

PG65 -**Planejamento racional de novos inibidores das enzimas aldolase e fosfofrutoquinase de Trypanosoma brucei**

FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; THIEMANN, Otavio Henrique; ANDRICOPULO, Adriano Defini..... 180

PG66 -**Deteção da proteína NS1 do vírus da Dengue utilizando transistores de efeito de campo de porta estendida e separada**

FIGUEIREDO, Alessandra; VIEIRA, Nirton Cristi Silva; AOKI, Sergio; ZUCOLOTTI, Valtencir; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo 181

PG67 -**Controle coerente do processo de fotocatalise, mediada por TiO_2 , induzida por pulsos de femtossegundos**

FIGUEREDO, Tarcisio Rocha; MENDONÇA, Cleber Renato 182

PG68 -**Estudos de modelagem molecular de candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas**

FIORAVANTI, César Maschio; GUIDO, Rafael Victório Carvalho; ANDRICOPULO, Adriano Defini 183

PG69 -**Descritores fractais aplicados à análise de texturas**

FLORINDO, João Batista; BRUNO, Odemir Martinez 184

PG70 -**Investigação da estrutura atômica de superfícies de platina utilizando a teoria do funcional da densidade**

FREIRE, Rafael Luiz Heleno Freire; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira 185

PG71 -**Estudos estruturais e funcionais da enzima beta-galactosidase LacZ2 de *Bifidumbacterium bifidum***

GODOY, Andre Schutzer de; CAMILLO, Cesar Moisés; MAGRINI, Fernando Peron; POLIKARPOV, Igor 187

PG72 -**Caracterização de nanoestruturas de Bi₂Te₃ preparas pelo método solvoter-mico**

GOLLINO, Felipe; MAREGA JUNIOR, Euclydes 189

PG73 -**Absorção cooperativa de dois e três fótons via colisões controladas**

GOMEZ, Eliceo Cortes; MOUSSA, Miled Hassan Youssef 191

PG74 -**Microestruturas com átomos de Rydberg frios**

GONÇALVES, Luis Felipe; KONDO, Jorge Douglas Massayuki; CABRAL, Jader de Souza; MARCASSA, Luis Gustavo 193

PG75 -**Atividade em redes direcionadas aplicada ao reconhecimento de textura em imagens**

GONÇALVES, Wesley Nunes; BRUNO, Odemir Martinez 194

PG76 -**Terapia fotodinâmica utilizando Iluminação com pulsos ultracurtos.**

GRECCO, Clóvis; PRATAVIEIRA, Sebastião; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina 195

PG77 -**Ressonância balística de spin em fios quânticos com múltiplas subbandas**

HACHIYA, Marco; USAJ, Gonzalo; EGUES, José Carlos 197

PG78 -**Estudo comparativo da arquitetura dos genomas de *Schistosoma mansoni* e *Schistosoma japonicum* utilizando recursos bioinformáticos**

JACINTO, Daniele Santini; DE MARCO, Ricardo 198

PG79 -**Caracterização de redes células neuronais na dinâmica de redes complexas**

JACQUES, Osvaldo Vargas; COSTA, Luciano da Fontoura 200

PG80 -**Sinterização a laser e caracterização dielétrica de cerâmicas de $CaCu_3Ti_4O_{12}$**

JESUS, Lílian Menezes; M'PEKO, Jean Claude; SILVA, Ronaldo Santos 201

PG81 -**O expoente de Lyapunov: a teoria de caos aplicada na criptografia**

JUSTO, Marina Jeaneth Machicao; MARTINEZ, Odemir Bruno 203

PG82 -**Sistema para estudar anisotropias em interações entre átomos de Rydberg ultra-frios**

KONDO, Jorge Douglas Massayuki; GONÇALVES, Luis Felipe; CABRAL, Jader; MARCASSA, Luis Gustavo 205

PG83 -**Caracterização estrutural e funcional da galectina 4 humana e seus domínios de reconhecimento de carboidratos**

KUMAGAI, Patricia Suemy; DYSZY, Fábio Henrique; BARUFFI, Marcelo Dias; NONATO, Maria Cristina; COSTA FILHO, Antonio José da 206

PG84 -**Filtro de Kalman não linear com redes neurais embarcado em uma arquitetura reconfigurável baseada em FPGA para uso dedicado em projeções tomográficas de raios X para ensaios da física de solos**

LAIA, Marcos Antonio de Matos; CRUVINEL, Paulo Estevão 207

PG85 -**Desenvolvimento de modelos e sistemas ópticos para otimização sistêmica em retinografia**

LENCIONE, Diego; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de 208

PG86 -**Estudo estrutural de proteínas da família Hidrolases de Glicosídeos 5**

LIBERATO, Marcelo Vizoná; POLIKARPOV, Igor 210

PG87 -**Aspectos termodinâmicos da gravitação semiclássica**

LIMA, Cesar Augustus Uliana Lima; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla.....211

PG88 -**ViTaMIn - visual table modeller interface: uma nova ferramenta para construção, análise e validação de modelos comparativos de proteínas**

LIMA, Gustavo Machado Álvares; GUIDO, Rafael Victório Carvalho212

PG89 -**Avaliação e caracterização de potenciais substratos para produção do etanol de segunda-geração**

LIMA, Marisa Aparecida de; GOMEZ, Leonardo; McQUEEN-MASON, Simon; POLIKARPOV, Igor.....213

PG90 -**Novidades em teorias de calibre e solitons**

LUCHINI, Gabriel; FERREIRA, Luiz Agostinho; ZAKRZEWSKI, Wojtek214

PG91 -**Estudo teórico e experimental de OFETs usando PMMA e P3HT**

MACIEL, Alexandre de Castro; FARIA, Roberto Mendonça216

PG92 -**Caracterização de novas substâncias com atividade antitumoral**

MAGALHÃES, Luma Godoy; ANDRICOPULO, Adriano Defini217

PG93 -**Heme oxigenase de Plasmodium falciparum: estudos de biologia molecular estrutural**

MALUF, Fernando Vasconcelos; GARCIA, Célia Regina da Silva; OLIVA, Glaucius; GUIDO, Rafael Victório Carvalho218

PG94 -**Moléculas de KRb no estado vibracional fundamental**

MARANGONI, Bruno Spolon; MENEGATTI, Carlos Renato; MARCASSA, Luis Gustavo.220

PG95 -**Nanomateriais teranósticos aplicados à problemática do câncer e estudos de nanotoxicidade**

MARANGONI, Valeria Spolon; ZUCOLOTTTO, Valtencir221

PG96 -**Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco Gymnotus carapo**

MATIAS, Paulo; SLAETS, Jan Frans Willem222

PG97 -**Modelagem in silico da absorção intestinal humana através da permeabilidade em células Caco-2**

MATOS, Karina Silvia; MODA, Tiago Luiz; ANDRICOPULO, Adriano Defini..... 223

PG98 -**Caracterização estrutural e funcional de FleQ de Pseudomonas e Xanthomonas: um importante fator de transcrição envolvido na expressão de genes flagelares e formação de biofilme.**

MATSUYAMA, Bruno Yasui; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles..... 224

PG99 -**Teletransporte de superposições espaciais e litografia atômica via Stern-Gerlach óptico**

MAXIMO, Carlos Eduardo; MOUSSA, Miled Hassan Youssef 226

PG100 -**Estudo estrutural e óptico de filmes finos do sistema Y2O3-Al2O3-SiO2-Er2O3 via método Pechini e evaporação por feixe de elétrons**

MENDES, Alessandra Carla; HERNANDES, Antonio Carlos; MAIA, Lauro June Queiroz; SIU LI, Maximo 227

PG101 -**Engenharia de interações lineares e não lineares**

MERCADO, Wilson Enrique Rosado; MOUSSA, Miled Hassan Youssef..... 228

PG102 -**Caracterização da Enterococcal leucine-rich protein A (ElrA) de Enterococcus faecalis**

MERLO, Thaís Panhan; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha; NASCIMENTO, Alessandro Silva; SERRA, Pascale 229

PG103 -**Bioquímica estrutural das enzimas envolvidas na biossíntese de c-di-AMP em Staphylococcus aureus**

MESQUITA, Nathalya Cristina de Moraes Roso; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles..... 231

PG104 -**Medição de efeitos coletivos na pressão de radiação sobre nuvens ultrafrias de estrôncio**

MIGUEZ, Maria Luiza; COURTEILLE, Philippe Wilhelm 232

PG105 -**Interação de compostos com atividade sobre a enzima cruzafina em monocamadas de Langmuir como modelo de membrana celular**

MONTANHA, Érica Azzolino; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de; ANDRICOPULO, Adriano Defini..... 233

PG106 -**Análise dos tempos de relaxação de núcleos de ^1H de moléculas de água confinadas em poros de cerâmicas de alumina**

MONTRAZI, Elton Tadeu; FORTULAN, Carlos Alberto; FONTES, Sérgio Rodrigues; BONAGAMBA, Tito José 234

PG107 -**Desenvolvimento de técnicas de precessão livre no estado estacionário (SSFP) com alternância de fase para aquisição rápida de espectros de RMN em alta resolução**

MORAES, Tiago Bueno de; COLNAGO, Luiz Alberto..... 235

PG108 -**Estudos bioquímicos e estruturais do complexo SEPT5/7/8**

MORAIS, Sinara Teixeira do Brasil; ARAÚJO, Ana Paula Ulian..... 237

PG109 -**Identificação de potenciais receptores e determinantes da endocitose numa proteína inativadora de ribossomo tipo 2**

MOREIRA, Helene Hellen Teixeira; ARAUJO, Ana Paula Ulian 238

PG110 -**Efeitos de íons fluoretos em ambientes locais de vidros e cerâmicas oxifluoretos dopados com terras raras: estudo estrutural por métodos de ressonância magnética**

MOREIRA, Raphaell; ECKERT, Hellmut..... 239

PG111 -**Radiação de uma nuvem de estrôncio**

MORIYA, Paulo Hisao; COURTEILLE, Philippe Wilhelm 240

PG112 -**Otimização crítica e criticalidade sem leis de potência**

MOSQUEIRO, Thiago Schiavo; MAIA, Leonardo Paulo..... 241

PG113 -**Estudo de biologia molecular estrutural da enzima enolase de Plasmodium falciparum.**

MULINARI, Evandro José; MALUF, Fernando Vasconcelos; GARCIA, Célia Regina da Silva; GUIDO, Rafael Victório Carvalho 243

PG114 -**Estudo computacional da difusão térmica em proteínas termoestáveis**

MUNIZ, Heloisa dos Santos; MARTINEZ, Leandro 245

PG115 -**Estudos estruturais e funcionais de receptores de c-di-GMP transmembranares envolvidos em virulência e formação de biofilmes bacterianos**

ROSSETO, Flavio Rodolfo; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles 247

PG116 -**Determinação da estrutura da proteína U5-15K de Trypanosoma brucei por ressonância magnética nuclear de alta resolução**

NEUBER, Pedro Michelao; SILVA, Marco Túlio Alves da; THIEMANN, Otavio Henrique; MUNTE, Claudia Elisabeth..... 249

PG117 -**Estudo de interfaces líquido-ar com microscopia de geração de soma de frequência**

OITICICA, Pedro Ramon Almeida; MIRANDA, Paulo Barbeitas 251

PG118 -**Análise epidemiológica e molecular de Staphylococcus aureus resistentes à meticilina (MRSA) isolados de colonização de pacientes HIV positivos de um hospital de Ribeirão Preto**

OKADO, Jéssica Baleiro; GIR, Elucir; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha 252

PG119 -**Ambientes de coordenação em xerogéis fotocrômicos híbridos, estudados por ressonância magnética nuclear de alta resolução**

OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de; SCHNEIDER, José Fabian; RODRIGUES FILHO, Ubi-rajara Pereira 254

PG120 -**Controle coerente de geração de luz branca em fibra fotônica**

OLIVEIRA, Anderson Roberto de; SIQUEIRA, Jonathas de Paula; MISOGUTI, Lino; ZILIO, Sérgio Carlos 255

PG121 -**Sensoriamento de temperatura e deformação por redes de Bragg em fibras ópticas em torno de 800 nm**

OLIVEIRA, André Orlandi de; MISOGUTI, Lino; ZILIO, Sérgio Carlos..... 256

PG122 -**Equivalência entre modelo exatamente solúvel e Hamiltoniano de Kondo**

OLIVEIRA, Flávio Frois de; OLIVEIRA, Luiz Nunes de 257

PG123 -**Estudo da retenção de água em solos utilizando relaxometria por ressonância magnética nuclear**

OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo; ESTRADA, Ruben Auccaise; NOVOTNY, Etelvino Henrique; BALIEIRO, Fabiano de Carvalho; VIDOTO, Edson Luiz Gea; BONAGAMBA, Tito José..... 258

PG124 -**Fases geométricas em ressonância magnética nuclear e ressonância quadrupolar nuclear**

ONCEBAY SEGURA, Charlie; SOARES-PINTO, Diogo 259

PG125 -**Estudo e caracterização da proteína MEG14**

ORCIA, Débora; DE MARCO, Ricardo 260

PG126 -**Desenvolvimento e otimização de cavidade laser Raman Q-switched de aplicações oftalmológicas**

ORTEGA, Tiago Almeida; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de 261

PG127 -**Aplicação da transformação wavelet no estudo de sequências de aminoácidos em uma proteína artificial**

PALOMINO SALCEDO, David Leandro; COMBARIZA CRUZ, Ernesto 262

PG128 -**Interação da fototerapia com o estresse mecânico sobre a função osteo-muscular e tratamento da dor**

PAOLILLO, Fernanda Rossi; CORAZZA, Adalberto Vieira; PAOLILLO, Alessandra Rossi; FIORESE, Marcela Senne; KURACHI, Cristina; BAGNATO, Vanderlei Salvador 263

PG129 -**Aprimoramento das propriedades farmacocinéticas de insumos farmacêuticos anti-helmínticos**

PAULA, Karina de; ELLENA, Javier Alcides 265

PG130 -**Explorando as bases moleculares para a inibição da enzima Cruzaína de Trypanosoma cruzi**

PAULI, Ivani; ANDRICOPULO, Adriano Defini 266

PG131 -**Absorção cooperativa de dois fótons em uma amostra de átomos frios de sódio**

PEDROZO-PENAFIEL, Edwin; PAIVA, Rafael Rothganger de; VIVANCO, Franklin Adán Julca; BAGNATO, Vanderlei Salvador; FARIAS, Kilvia Mayre 268

PG132 -**Expressão heteróloga e caracterização da Endoglucanase I de *Trichoderma harzianum* em *Aspergillus niger***

PELLEGRINI, Vanessa de Oliveira Arnoldi; SILVA, Flávio Henrique; POLIKARPOV, Igor. 270

PG133 -**Zitterbewegung em átomos frios**

PENTEADO, Poliana Heiffig; EGUES, José Carlos..... 271

PG134 -**Transição de fase no modelo de Axelrod unidimensional**

PERES, Lucas Vieira Guerreiro Rodrigues; FONTANARI, José Fernando..... 273

PG135 -**Sincronização explosiva em redes complexas na presença de atrasos temporais**

PERON, Thomas Kauê Dal Maso; RODRIGUES, Francisco Aparecido 274

PG136 -**Estudo da influência de elementos transponíveis no processo evolutivo da multicelularidade de *Volvox carteri***

PHILIPPSEN, Gisele Strieder; DE MARCO, Ricardo..... 275

PG137 -**Estrutura eletrônica de sistemas hexagonais via o método $k \cdot p$**

PIRES, Diego Paiva; BERNARDES, Esmerindo de Sousa..... 276

PG138 -**Desenvolvimento de API e IDE para ressonância magnética**

PIZETTA, Daniel Cosmo; LOURENÇO, Gustavo Vilaça; DA SILVA, Danilo Mendes Delfino; FREIRE, Guilherme; COELHO, Felipe Bessa; MARTINS, Mateus José; VIDOTO, Edson Luiz Gea; TANNÚS, Alberto 278

PG139 -**Estudos estruturais da celobiohidrolase I de *trichoderma harzianum* IOC 3844**

COLUSSI, Francieli; POLIKARPOV, Igor..... 280

PG140 -**Computação quântica em RQN**

POLLI, Roberson Saraiva; OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo; BONAGAMBA, Tito José 281

PG141 -**Termodinâmica de gases ultra-frios em armadilhas harmônicas**

POVEDA-CUEVAS, Freddy Jackson; CASTILHO, Patrícia Christina Marques; MUNIZ, Sérgio Ricardo; BAGNATO, Vanderlei Salvador..... 282

PG142 -**Reconhecimento de gestos manuais utilizando câmeras de profundidade**

PRADO NETO, Elias Ximenes do; BRUNO, Odemir Martinez 283

PG143 -**Análise de composição de raios cósmicos de altas energias através de dados medidos pelo Observatório Pierre Auger**

PRADO, Raul; BELLIDO, Jose Alfredo; SOUZA, Vitor de 284

PG144 -**Um modelo estocástico para a transcrição dos genes de segmentação da *Drosophila melanogaster***

PRATA, Guilherme Nery; HORNOS, José Eduardo Martinho 287

PG145 -**Construção e caracterização de um microscópio óptico por absorção de dois fótons para imagens de sistemas biológicos.**

PRATAVIEIRA, Sebastião; GRECCO, Clóvis; COSCI, Alessandro; MISOGUTI, Lino; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina 289

PG146 -**Processamento digital de sinais de ressonância magnética nuclear através de redes neurais artificiais**

QUEIROZ, Guyllherme Emmanuel Tagliaferro de; GUIDO, Rodrigo Capobianco 290

PG147 -**Preparação e estudos espectroscópicos de materiais luminescentes baseados em complexos de Irídio(III) incorporados em vidros mesoporosos**

QUEIROZ, Thiago Branquinho de; BOTELHO, Moema de Barros e Silva; ECKERT, Hellmut; CAMARGO, Andrea Simone Stucchi de..... 292

PG148 -**Estudos funcionais e estruturais da classe de enzimas endoglucanase ghf45 aplicados ao desenvolvimento de coquetéis enzimáticos**

RAMIA, Marina Paglione; POLIKARPOV, Igor 293

PG149 -**Utilização de técnicas espectroscópicas e de imagens no estudo e caracterização de doenças em citros: Greening (HLB) e cancro cítrico.**

RANULFI, Anielle Coelho; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira; FERREIRA, Ednaldo José; VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro; KUBOTA, Thiago Massaiti Kuboyama; DA SILVA, Jéssica Thaíse Batista; SAUCE, Rafael Silva 294

PG150 -**Modelagem de grãos confinados em invólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem**

RIGO, Gustavo Vrech; COSTA, Luciano da Fontoura; CRUVINEL, Paulo Estevão 296

PG151 -**Seleção de coerências de múltiplo quantum por RMN em materiais com ordenamento magnético**

RIVERA ASCONA, Christian; BONAGAMBA, Tito José 297

PG152 -**Ordenamento em perovskitas complexas**

RODRIGUES, João Elias Figueiredo Soares; PASCHOAL, Carlos William de Araújo; MACIEL, Adilson Pereira; BEZERRA, Débora Moraes 298

PG153 -**Estudo estrutural da proteína old yellow enzyme de Trypanosoma cruzi**

RODRIGUES, Nathalia de Campos; CANDURI, Fernanda; OLIVA, Glaucius; BORGES, Júlio César 299

PG154 -**Intensificação da formação de PpIX e penetração de medicamentos tópicos para a terapia fotodinâmica**

RODRIGUES, Phamilla Gracielli Sousa; BAGNATO, Vanderlei Salvador 300

PG155 -**Fabricação de microestruturas dopadas com nanofios de ZnO via fotopolimerização por absorção de dois fótons**

RODRIGUEZ, Ruben Dario Fonseca; MENDONÇA, Cleber Renato 301

PG156 -**Cristalização da enzima Adenilosuccinato Liase (ADSL) da via de salvação de purinas do parasita Schistosoma mansoni**

ROMANELLO, Larissa; TORINI, Juliana Roberta; BRANDÃO NETO, José; DE MARCO, Ricardo; PEREIRA, Humberto D'Muniz 302

PG157 -**Estrutura atômica de nanopartículas empregando o algoritmo Basin-Hopping Monte Carlo**

RONDINA, Gustavo Garcia; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira 303

PG158 -**Quando e como medidas de centralidade são correlacionadas em redes complexas**

RONQUI, José Ricardo Furlan; TRAVIESO, Gonzalo 306

PG159 -**Simulação de efeitos quânticos relativísticos em armadilhas iônicas**

ROSSETTI, Rafael Furlan; MOUSSA, Miled Hassan Youssef 308

PG160 -**Utilização da citometria de fluxo na investigação da distribuição de doses limitares de culturas de células da linhagem HEPG2**

SABINO, Luis Gustavo; VOLLET-FILHO, José Dirceu; NOVAIS, Paulo César; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina 309

PG161 -**Geração de uma armadilha magneto-óptica de estrôncio**

SALAS, Andres Rodriguez; COURTEILLE, Philippe Wilhelm 311

PG162 -**Integração numérica da equação de Langevin de transições de fase para o estado absorvente**

SANTAMARIA, Julian Andres Jaimes; MAIA, Leonardo Paulo 313

PG163 -**Imobilização da enzima glicose oxidase em filmes nanoestruturados para aplicação em biossensores**

SANTOS, Jaciara Cássia de Carvalho; ZUCOLOTTI, Valtencir 314

PG164 -**Base estrutural do dual agonista GL479 para os receptores nucleares PPAR α e PPAR γ .**

SANTOS, Jademilson Celestino dos; NASCIMENTO, Alessandro Silva; POLIKARPOV, Igor 315

PG165 -**Aspersão dinâmica em tempo real de glutamato à centros geradores de padrão**

SANTOS, Jessica dos; PINTO, Reynaldo Daniel 316

PG166 -**Identificação de novos moduladores demicrotúbulos para o tratamento do câncer**

SANTOS, Ricardo Nascimento dos; FERNANDES, Daniara Cristina; COELHO, Fernando; ANDRICOPULO, Adriano Defini 317

PG167 -**Identificação de lesões de melanoma em pele por análise de imagens**

SBRISSA NETO, David Antonio; TRAVIESO, Gonzalo; COSTA, Luciano da Fontoura; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina 319

PG168 -**Proposta de procedimento de alinhamento automático de sistemas ópticos por meio de frente de onda via polinômios de Zernike**

SCADUTO, Lucimara Cristina Nakata; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de 320

PG169 -**Tomógrafo de espalhamento Compton para estudos da física de solos em ambiente de campo**

SCANNAVINO JR., Francisco de Assis; CRUVINEL, Paulo Estevão 321

PG170 -**O algoritmo de Metropolis para o cálculo de integrais de trajetória**

SERENONE, Willian Mاتيoli; MENDES, Tereza Cristina da Rocha; SLAPIK, Aleksandra. 322

PG171 -**Complexos macromoleculares da via específica de incorporação de selênio de Escherichia coli**

SERRÃO, Vitor Hugo Balasco; MANZINE, Livia Regina; SILVA, Ivan Rosa e; BETTINI, Jefferson; PORTUGAL, Rodrigo Villares; VAN HEEL, Marin; THIEMANN, Otavio Henrique 324

PG172 -**Determinação da estrutura e função da uridina fosforilase de Schistosoma mansoni**

SILVA NETO, Antônio Marinho da; TORINI, Juliana Roberta; ROMANELLO, Larissa; CASSAGO, Alexandre; DE MARCO, Ricardo; BRANDÃO NETO, José; GARRATT, Richard Charles; D'MUNIZ, Humberto Pereira 326

PG173 -**Inativação fotodinâmica dos fungos causadores da onicomicose**

SILVA, Ana Paula; KURACHI, Cristina; BAGNATO, Vanderlei Salvador; INADA, Natalia Mayumi 327

PG174 -**Espectroscopia por Ressonância Magnética resolvida no tempo através do método FDM**

SILVA, Cíntia Maira Pereira; VIDOTO, Edson Luiz Gea; MAGON, Cláudio José; PAIVA, Fernando Fernandes; TANNÚS, Alberto 329

PG175 -**Recorrência de sintons supramoleculares em cocristais de 5-fluorocitosina com ácidos dicarboxílicos**

SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da; PEPINO, Rebeka de Oliveira; ELLENA, Javier Alcides 331

PG176 -**Console multiplataforma para medidas de relaxometria em espectrômetro digital de ressonância magnética**

SILVA, Danilo Mendes Dias Delfino; LOURENÇO, Gustavo Vilaça; FREIRE, Guilherme; COELHO, Felipe Bessa; PIZETTA, Daniel Cosmo; MARTINS, Mateus José; VIDOTO, Edson Luiz Gea; TANNÚS, Alberto 333

PG177 -**Redes complexas geográficas multidimensionais**

SILVA, Filipi Nascimento; COSTA, Luciano da Fontoura..... 335

PG178 -**Estudo de EPR do complexo dinuclear de cobre com ácido santônico**

SILVA, Igor d'Anciães Almeida; GONZALEZ, Jose Pedro Donoso; ETCHEVERRY, Susana; NASCIMENTO, Otaciro Rangel 337

PG179 -**Produção heteróloga dos complexos Sm envolvidos no processamento do pré-mRNA de Trypanosoma brucei**

SILVA, Ivan Rosa e; SILVA, Marco Túlio Alves da; THIEMANN, Otavio Henrique 339

PG180 -**Modelagem computacional da transmissão óptica via geração de plasmons em fendas subwavelength**

SILVA, Otávio de Brito; FERRI, Fabio Aparecido; GARCIA RIVERA, Victor Anthony; OSÓRIO, Sérgio Paulo Amaral; BORGES, Ben-Hur Viana; ZANATTA, Antônio Ricardo; WEINER, John; MAREGA JUNIOR, Euclides 340

PG181 -**Estrutura cristalográfica da região citoplasmática da proteína PelD, um precursor da biossíntese de polissacarídeo em Pseudomonas aeruginosa**

SILVA, Sumária Sousa; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles 342

PG182 -**Interação spin-carga em ferromagnetos itinerantes unidimensionais**

SILVEIRA, Hudson Pimenta; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves 343

PG183 -**Informação sensorial e o controle motor do voo em Chrysomya megacephala**

SILVERIO, Carolina Menezes; KOBERLE, Roland; PINTO, Reynaldo Daniel 345

PG184 -**Influência de modelos de interação hadrônica na medida de composição de raios cósmicos**

SOARES, Hendrik Marques; SOUZA, Vitor de 346

PG185 -**Descoerência e emaranhamento no efeito de magneto-recepção**

SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico; PINTO, Diogo de Oliveira Soares..... 347

PG186 -**Interação de QD's com SPP's**

SOBREIRA, Fernando Wellysson de Alencar; MAREGA JUNIOR, Euclides; SUKHAREV, Maxim 348

PG187 -**Modelo de circuito elétrico em capacitores EIS com bicamadas de PAMAM/SWNT**

SOUSA, Marcos Antonio Moura de; SIQUEIRA JUNIOR, José Roberto; VERCÍK, Andrés;
OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de 350

PG188 -**Fabricação e caracterização de células eletroquímicas emissora de luz**

SOUSA, Washington da Silva; FÁRIA, Roberto Mendonça 351

PG189 -**Estrutura da enzima Nucleosídeo Difosfato Quinase (NDPK) de Schistosoma mansoni**

SOUZA, Juliana Roberta Torini de; ROMANELLO, Larissa; BRANDÃO NETO, José;
PEREIRA, Humberto D'Muniz 352

PG190 -**Planejamento e otimização de novos inibidores da enzima cruzaina de Trypanosoma cruzi**

SOUZA, Mariana Laureano de; ANDRICOPULO, Adriano Defini 354

PG191 -**Investigação da dosimetria para TFD com o uso de fibra difusora: modelos in vitro e in vivo**

STRINGASCI, Mirian Denise; FORTUNATO, Thereza Cury; MORIYAMA, Lilian Tan;
BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina 355

PG192 -**Mecanismos da geração de vórtices em superfluidos através de excitação oscilatória**

TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti; TELLES, Gustavo Deczka; SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo; CASTELO BRANCO, Cora; BAGNATO, Guilherme de Guzzi; FARIAS, Kilvia Mayre; BAGNATO, Vanderlei Salvador 356

PG193 -**Determinação da estrutura da proteína P21 de Trypanosoma cruzi por ressonância magnética nuclear de alta resolução**

TEIXEIRA, Francesco Brugnera; MOREIRA, Helene Hellen Teixeira; HORJALES, Eduardo; MUNTE, Claudia Elisabeth 358

PG194 -**Dinâmica de tempos curtos via hierarquia de equações de evolução do operador densidade do sistema**

TEIZEN, Víctor Fernandes; MOUSSA, Miled Hassan Youssef 359

PG195 -**Dinâmica de expansão de um CBE 2D: teste de vários Ansätze**

TELES, Rafael Polisel; SANTOS, Francisco Ednilson Alves dos; CARACANHAS, Mônica Andrioli; BAGNATO, Vanderlei Salvador 360

PG196 -**Estudos estruturais e funcionais de expansinas, proteínas semelhantes à expansinas e swoleninas**

TOMAZINI JÚNIOR, Atílio; POLIKARPOV, Igor 361

PG197 -**Fabricação de microestruturas poliméricas dopadas com nanopartículas de ouro**

TRIBUZI, Vinicius; CORREA, Daniel Souza; MENDONÇA, Cleber Renato 362

PG198 -**Fotofísica de polieletrólitos automontados na superfície de nanopartículas de poliestireno**

TSUTAE, Fernando Massayuki; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo 363

PG199 -**Redes complexas aplicadas a estudos da linguagem**

VALENCIA, Camilo Akimushkin; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de 364

PG200 -**Análise e caracterização de nanoestruturas de polímeros mediante imagens****AFM**

VALENCIA, Carolina Elisa Guillen; SILVA, Marcelo Pereira da; FARIA, Roberto Mendonça; BRUNO, Odemir Martinez 365

PG201 -**Emaranhamento e discórdia quântica na superradiância**

VEIGA, Rodrigo Soares; MOUSSA, Miled Hassan Youssef 366

PG202 -**Análise da relação estrutura e função em isoenzimas e em uma proteína putativa de *Streptomyces clavuligerus* envolvidas na biossíntese de ácido clavulânico.**

VIEIRA, Débora Fernanda; GOTO, Leandro Seiji; CHELESKI, Juliana; ARAUJO, Ana Paula Ulian de 367

PG203 -**Computação evolutiva aplicada à criatividade artística**

VIEIRA, Vilson; FABBRI, Renato; TRAVIESO, Gonzalo; COSTA, Luciano da Fontoura... 369

PG204 -**Sistema experimental para a produção de moléculas fotônicas de sódio numa armadilha magneto óptica**

VIVANCO, Franklin Adán Julca; PAIVA, Rafael Rothganger de; PEDROZO-PEÑAFIEL, Edwin; FARIAS, Kilvia Mayre; BAGNATO, Vanderlei Salvador 370

PG205 -**Construção de um sistema de imagem de fluorescência usando filtro óptico variável de cristal líquido para detecção de doenças em citros**

WETTERICH, Caio Bruno; MARCASSA, Luis Gustavo 372

PG206 -**Relaxação magnética em ligas magnéticas diluídas**

ZAWADZKI, Krissia de; OLIVEIRA, Luiz Nunes de 373

Índice de autores..... 387

Summary

Undergraduate Research Workshop

IC25 - Trapping one-dimensional quantum gases

SMAIRA, André de Freitas; CARACANHAS, Mônica Andrioli; BAGNATO, Vanderlei Salvador 82

Graduate Research Workshop

PG12 -

Deforming the Bullough-Dodd model

AURICHIO, Vinicius Henrique; FERREIRA, Luiz Agostinho; FOSTER, David 107

PG43 -

Thermodynamical analysis of a trapped BEC: characterization of the experimental setup

CASTILHO, Patrícia Christina Marques; POVEDA-CUEVAS, Freddy Jackson; MUNIZ, Sérgio Ricardo; MAREGA JUNIOR, Euclides; BAGNATO, Vanderlei Salvador 148

PG45 -

Network model predicts amino acid residues important for heat diffusion in GH11 Xylanases

CENSONI, Luciano; MARTINEZ, Leandro 152

PG71 -

Structure and functional studies of the enzyme beta-galactosidase LacZ2 from Bifidobacterium bifidum

GODOY, Andre Schutzer de; CAMILLO, Cesar Moisés; MAGRINI, Fernando Peron; POLIKARPOV, Igor 187

PG81 -

Lyapunov exponent: chaos theory applied to cryptography

JUSTO, Marina Jeaneth Machicao; MARTINEZ, Odemir Bruno 203

PG82 -**A system to study anisotropy in interactions between cold Rydberg atoms**

KONDO, Jorge Douglas Massayuki; GONÇALVES, Luis Felipe; CABRAL, Jader; MAR-CASSA, Luis Gustavo 205

PG90 -**Novelties in gauge theories and solitons**

LUCHINI, Gabriel; FERREIRA, Luiz Agostinho; ZAKRZEWSKI, Wojtek 214

PG91 -**Theoretical and experimental study of bottom-gate OFETs using P3HT and PMMA**

MACIEL, Alexandre de Castro; FARIA, Roberto Mendonça 216

PG112 -**Critical optimization and criticality without power laws**

MOSQUEIRO, Thiago Schiavo; MAIA, Leonardo Paulo 241

PG114 -**Computational study of thermal diffusion in thermostable proteins**

MUNIZ, Heloisa dos Santos; MARTINEZ, Leandro 245

PG130 -**Insights into the molecular basis for the inhibition of Cruzain from Trypanosoma cruzi**

PAULI, Ivani; ANDRICOPULO, Adriano Defini 266

PG133 -**Zitterbewegung in cold atoms**

PENTEADO, Poliana Heffig; EGUES, José Carlos 271

PG143 -**Ultra high energy cosmic rays composition analysis using Pierre Auger Observatory measured data**

PRADO, Raul; BELLIDO, Jose Alfredo; SOUZA, Vitor de 284

PG157 -**Atomic structure of nanoparticles employing the Basin-Hopping Monte Carlo algorithm**

RONDINA, Gustavo Garcia; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira 303

PG158 -**When and how centrality measures are correlated in complex networks**

RONQUI, José Ricardo Furlan; TRAVIESO, Gonzalo 306

PG170 -**The Metropolis algorithm for evaluation of path integrals**

SERENONE, Willian Matioli; MENDES, Tereza Cristina da Rocha; SLAPIK, Aleksandra. 322

PG171 -**Macromolecular assemblies of selenium incorporation specific pathway in Escherichia coli**

SERRÃO, Vitor Hugo Balasco; MANZINE, Livia Regina; SILVA, Ivan Rosa e; BETTINI, Jefferson; PORTUGAL, Rodrigo Villares; VAN HEEL, Marin; THIEMANN, Otavio Henrique 324

PG182 -**Spin-charge interaction in one-dimensional itinerant ferromagnets**

SILVEIRA, Hudson Pimenta; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves 343

PG186 -**Interaction of QD with SPP's**

SOBREIRA, Fernando Wellysson de Alencar; MAREGA JUNIOR, Euclydes; SUKHAREV, Maxim 348

PG192 -**Mechanism of vortices generation for a trapped superfluid under oscillatory excitation**

TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti; TELLES, Gustavo Deczka; SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo; CASTELO BRANCO, Cora; BAGNATO, Guilherme de Guzzi; FARIAS, Kilvia Mayre; BAGNATO, Vanderlei Salvador 356

PG206 -**Magnetic relaxation in dilute magnetic alloys**

ZAWADZKI, Krissia de; OLIVEIRA, Luiz Nunes de 373

Authors index 387



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

Resumos

Workshop de Iniciação Científica

Abstracts - Undergraduate Research Workshop



II Semana do IFSC, 16 a 19 de outubro 2012, São Carlos-SP

IC1

Otimização de potenciais empíricos para nanopartículas de metais de transição utilizando dados ab-initio

AGE, Paulo Rogerio Pereira S¹; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira¹

pauloage@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

Nanopartículas (NPs) de metais de transição são largamente estudadas em nanociência, em particular, devido ao grande número de aplicações de metais de transição em catálise e eletroquímica. Entretanto, o nosso conhecimento da estrutura atômica de NPs de metais de transição é insuficiente comparado ao conhecimento existente para estruturas cristalinas devido às dificuldades em obter diretamente a estrutura atômica de NPs em razão da ausência de periodicidade de longo alcance. Portanto, simulações computacionais (1) possuem uma grande importância na solução destes problemas, entretanto, cálculos computacionais utilizando métodos de primeiros princípios com base na Teoria do Funcional da Densidade (2) possuem custo computacional muito alto. Uma alternativa viável para reduzir o custo computacional é a utilização de potenciais empíricos, os quais possuem um custo computacional menor por várias ordens de magnitude. Neste projeto, temos o objetivo de desenvolver um algoritmo para realizar a parametrização de potenciais empíricos (Lennard-Jones, Sutton-Chen, Gupta, etc) utilizando dados obtidos através da teoria do funcional da densidade para NPs de metais de transição. No presente momento, o algoritmo implementado fornece resultados muito bons para o fitting de um pequeno conjunto de parâmetros para clusters de Lennard-Jones. Para potenciais com cinco parâmetros, os resultados são razoavelmente bons, entretanto, requer custo computacional maior devido ao grande espaço de busca dos parâmetros.

Palavras-chave: Fitting - parametrização. Algoritmo genético. Nanopartículas.

Referências:

- 1 KELLEY, A.; POHL, I . **A book on C** . 4th ed. Reading, Mass: Addison-Wesley, c1998. .
- 2 ATKINS, P.; JONES, L . **Princípios de química**: questionando a vida moderna e o meio ambiente . Porto Alegre: Bookman, 2006. .

IC2

Enzima seril-tRNA sintetase de *Trypanosoma brucei* sob análise molecular

EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti¹; BELLINI, Natália Karla²; THIEMANN, Otavio Henrique¹
natbellini@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centro de Ciências Biológicas e da Saúde - UFSCar

Selenoproteínas tem sido alvo crescente de estudos moleculares por conter o 21º aminoácido, selenocisteína (Sec), sendo este composto por Selênio (Se), elemento conhecido por sua atividade antioxidante e por aspectos terapêuticos, quimiopreventivos, anti-inflamatórios, além das propriedades anti virais. (1) Selenocisteínas incorporam selênio ao peptídeo nascente das selenoproteínas e lhes conferem propriedades fundamentais á saúde humana. (2) A biossíntese de Sec requer uma maquinaria molecular específica que foi descrita com mais detalhes em *Escherichia coli*, mas tem sido elucidada também para eucariotos e inicia-se com a aminoacilação do tRNA de inserção de selenocisteína, Ser-tRNA^{Sec} (SelC) com uma serina, pela Seril-tRNA Sintetase (SerRS). (3) Para total compreensão do processo de incorporação co-traducional das selenocisteínas em eucariotos são necessárias mais análises, como exemplo a presente pesquisa que tem foco nos estudos moleculares da enzima inicial da via, a Seril-tRNA Sintetase de *Trypanosoma brucei*. A mesma já se encontrava clonada, em sua forma recombinante, e expressa em *E. Coli* na fração solúvel, então os procedimentos metodológicos envolveram testes de purificação com 60% de sulfato de amônio, seguido de resinas de hidrofobicidade e afinidade por níquel. Além destes, experimentos de gel nativo, DLS (dynamic light scattering) e fluorescência de anisotropia foram realizados permitindo o estabelecimento dos padrões enzimáticos. A proteína apresentou um raio hidrodinâmico de 4,32nM e massa molecular de 110kDa e foi confirmada, em gel nativo, a presença de uma única população protéica após a purificação. Pela técnica de anisotropia de fluorescência foi revelada a conformação dimérica para a proteína recombinante, em concentrações acima de 150nM, e experimentos preliminares demonstraram resultados interessantes indicando a ligação da enzima com seu tRNA específico, o tRNA Ser-tRNA^{Sec} o que permite continuar a investigação em busca de informações sobre as isoformas de Seril-tRNA Sintetase e sua interação com SelC.

Palavras-chave: Seril-tRNA Sintetase. Selenoproteínas. *Trypanosoma brucei*.

Referências:

- 1 PAPP, L. V. From selenium to selenoproteins: synthesis, identity, and their role in human health. **Antioxidants & Redox Signaling**, v. 9, n. 7, p. 775-806, 2007.
- 2 BÖCK, 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.
- 3 HATFIELD, D. L.; GLADYSHEV, V. N. How selenium has altered our understanding of the genetic code. **Molecular Cell Biology**, v. 22, n. 11, p. 3565-76, 2002.

IC3

Investigação do equilíbrio monômero-dímero da canacistatina-1 por ressonância magnética nuclear de alta resolução

CAVINI, Italo Augusto¹; GARRATT, Richard Charles¹; SILVA, Flávio Henrique²; KALBITZER, Hans Robert³; MUNTE, Claudia Elisabeth¹
italo.cavini@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Genética e Evolução - UFSCar

³Institut für Biophysik und Physikalische Biochemie - Universidade de Regensburg - Alemanha

A superfamília das cistatinas, amplamente distribuídas em vertebrados, invertebrados e plantas, é uma classe de proteínas capazes de inibir, competitiva e reversivelmente, cisteíno proteases. Em mamíferos, as principais cisteíno proteases são as catepsinas lisossomais B e L, as quais fazem parte da subfamília da papaína.(1) Em especial, a catepsina humana B está envolvida em uma série de enfermidades, entre elas distrofia muscular, artrite, câncer e doenças neurodegenerativas. Cistatinas de plantas, ou fitocistatinas, são caracterizadas pela ausência de pontes dissulfeto e pela presença de uma sequência consenso do tipo L-A-R-F-A-V na região N-terminal. A orizacistatina-1, oriunda do arroz (*Oryza sativa*), é a fitocistatina mais bem estudada, tendo sua estrutura determinada por RMN (número de acesso pdb 1EQK). Seu enovelamento pode ser descrito como uma folha- β antipalalela formada por cinco fitas- β envolvendo uma α -hélice central. Cistatinas de cana-de-açúcar (*Saccharum officinarum*), conhecidas como canacistatinas, foram caracterizadas e, em especial, a estrutura cristalográfica da canacistatina-1 (números de acesso pdb 3UL5 e 3UL6) foi recentemente obtida por parceiros de colaboração,(2) apresentando uma forma dimérica *domain-swapped*, na qual a folha- β de um monômero se entrelaça com a do outro em função de uma união entre as fitas $\beta 2$ e $\beta 3$ (fita- $\beta 2,3$), eliminando a volta L1. É esperado que essa união acarrete na inatividade do dímero, uma vez que a volta L1 é essencial na inibição às cisteíno proteases. Visando a análise estrutural da canacistatina-1 em um ambiente mais fisiológico, foram realizados experimentos de RMN de alta resolução em solução na proteína. Um conjunto de medidas de RMN multidimensional de alta resolução foi adquirido para uma amostra de canacistatina-1 isotopicamente enriquecida $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$. Os espectros de tripla ressonância HNCA, CBCA(CO)NH e HNCO foram usados para assinalar os picos da cadeia principal enquanto que o espectro H(C)CH-TOCSY foi utilizado no assinalamento de cadeias laterais alifáticas.(3) Uma inspeção cuidadosa dos espectros revelou a existência de duas populações conformacionais em troca lenta, uma dominante (picos intensos) e outra secundária (picos fracos). O índice de deslocamento químico (CSI) consenso, que prediz a estrutura secundária baseada nos deslocamentos químicos, foi calculado para ambas as populações, revelando que na população dominante ocorre a formação da fita- $\beta 2,3$ condizente com a formação do dímero *domain-swapping*. Os resultados da população secundária confirmam a homologia com a estrutura secundária da orizacistatina-1 monomérica. Com o propósito de investigar a relevância fisiológica dessa estrutura, foram realizados experimentos de RMN com variação de pressão e temperatura. Os espectros 1H-15N-HSQC revelaram a existência de um novo estado intermediário entre monômero e dímero, sugerindo haver uma conversão entre estes que pode ser detectada e analisada experimentalmente.

Palavras-chave: Canacistatina. Inibidor de cisteíno protease. RMN.

Referências:

- 1 MCGRATH, M. The lysosomal cysteine proteases. **Annual Review Biophysics Biomolecular Structure**, v.28, p.181-204, 1999. DOI:10.1146/annurev.biophys.28.1.181.
- 2 VALADARES, N. F.; OLIVEIRA-SILVA, R.; CAVINI I. A.; et al. X-ray crystallography and NMR studies of the domain swapped canecystatin-1. Em elaboração.
- 3 CAVINI, I. A. et al. Chemical shifts assignments of the canecystatin-1 from *Saccharum officinarum*. **Biomolecular NMR Assignments**, 2012. In press.

IC4

Expressão e purificação de um complexo de septinas

CUNHA, João Victor de Souza¹; MACEDO, Joci Neuby Alves¹

ammvitor@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As septinas pertencem a uma família de GTPases que foram identificadas inicialmente em leveduras, estando presente em diversos eucariotos, exceto em plantas. Estruturalmente, as septinas são formadas basicamente por três regiões, um domínio N-terminal variável e rico em prolina, um domínio central GTPase e um domínio C-terminal predito coiled-coil. Em humanos foram identificadas 13 septinas as quais foram classificadas em 4 grupos. Dentro destes grupos elas se combinam originando complexos hexaméricos como o formado pelas septinas: 7-6-2-2-6-7. (1) Há várias evidências da importância das septinas em processos celulares, além disso, tem sido observada a presença dessas proteínas em corpos de inclusões citoplasmáticas, relacionados a doenças neurodegenerativas (Parkinson e Alzheimer) e a alguns tipos de câncer. Os objetivos desse projeto são definir protocolos de expressão e purificação do complexo proteico formado pelas septinas 5,6,7 com finalidade de realizar ensaios de cristalização. Os resultados deste trabalho contribuirão para o avanço no entendimento dos heterocomplexos de septinas e de como essas proteínas interagem entre si nesse arranjo.

Palavras-chave: Septinas. Biofísica. Complexo.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M. et al. Structural insight into filament formation by mammalian septins. *Nature*, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.

IC5

Análise quantitativa de nanopartículas poliméricas a partir do uso da difração de raios X pelo método do pó.

DA SILVA, Geisiane Rosa¹; DOS SANTOS, Amanda Luizetto¹; SANCHES, Edgar Aparecido¹; MASCARENHAS, Yvonne Primerano¹
geisiane.silva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O ácido láctico (ácido 2-hidroxi propanóico), extensivamente utilizado na área farmacêutica e biomédica, também é usado na síntese do poli(ácido láctico)-PLA, para a liberação lenta e gradual de fármacos no organismo, proporcionando doses menores e controladas ao tratamento proposto. (1) Por outro lado, polissacarídeos como a *Dextrana*, apresentam características que permitem a formação de nanopartículas estáveis quando incorporados em polímeros. (2) Sua aplicabilidade na área médica-farmacêutica se dá por este ser biodegradável e não tóxico ao organismo. Neste trabalho analisou-se nanopartículas poliméricas de eugenol através da técnica de Difração de Raios X (DRX). A coleta de dados foi realizada no Laboratório de Raios X do Grupo de Cristalografia do IFSC, utilizando-se o equipamento *Rigaku Rotaflex* equipado com monocromador de grafite e ânodo rotatório, operando com $CuK\alpha$, 50kV e 100mA. Os difratogramas foram obtidos em modo contínuo, $2\theta = 5^\circ - 80^\circ$ com passos de 0.02° e 2 segundos/passos. O programa *Peak Fitting Module*, incluso no programa *Microcal Origin* versão 8.1 foi utilizado para a determinação do percentual de cristalinidade das amostras de PLA, Dextrana e da nanopartícula (PLA + Dextrana + eugenol). A função Gaussiana foi utilizada como função de ajuste e na determinação do percentual cristalino das amostras obtido pela razão entre as áreas dos picos cristalinos e a área de contribuição da fase amorfa no difratograma. (3) Através da DRX observou-se que os difratogramas apresentam diferentes perfis, e os percentuais de cristalinidade encontrados para as amostras de PLA, Dextrana e da nanopartícula de eugenol foram, respectivamente, 33%, 32% e 18%. Novos estudos serão propostos.

Palavras-chave: Cristalografia. Difração de raios X. Nanopartículas.

Referências:

1 JAHNO, V. D. **Síntese e caracterização do poli(L-ácido láctico) para uso como bio-material**. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2005.

2 BELDER, A. N. de. **DEXTRAN**. Disponível em: <http://www-esbs.u-strasbg.fr/notesdecours/2eme-annee/purification_prot/PDF/18116612AA.pdf> . Acesso em: 10 ago. 2012.

3 SANCHES, E. A. **Estudos de XRD e SAXS aplicados à Polianilina e à Poli(o-metoxianilina)**. Tese (Doutorado em Ciência e Engenharia de Materiais) - Instituto de Física de São Carlos, Instituto de Química de São Carlos, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

IC6

Desenvolvimento da óptica de telescópios para experimentos de astrofísica de partículas

DIPOLD, Jessica¹; SOUZA, Vitor de¹

jessica.dipold@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Para realizar observações astrofísicas em raios gama o principal experimento utilizado é o telescópio do tipo Cherenkov, o qual é constituído por uma série de espelhos com uma formatação especial que permite a formação de imagens para a observação da trajetória dos raios gama após sua passagem pela atmosfera através da radiação Cherenkov emitida pelos mesmos. Há atualmente diversos experimentos em funcionamento, como o HESS e o VERITAS e recentemente foi proposto um projeto para o desenvolvimento de um novo observatório, o CTA (Cherenkov Telescope Array). Este novo experimento será constituído de uma centena de telescópios Cherenkov em diferentes tamanhos para possibilitar a observação em diversos alcances energéticos. O objetivo deste projeto é o desenvolvimento de diversos testes em amostras de espelhos propostos para o CTA. Utilizando substratos quadrados de espelhos com 50 cm de lado vindos do CEA (Commissariat d'Énergie Atomique), Paris, França, realizamos uma série de testes. Anteriormente foram realizadas medidas de curvatura e o recobrimento destes substratos com alumínio pela empresa Opto Eletrônica, o que deu procedimento à medidas de refletividade e a criação de pequenas amostras circulares que foram submetidas a testes ambientais. Para testar a aderência e a durabilidade da cobertura de alumínio, decidimos expor os espelhos de 50 cm a condições ambientes. Inicialmente buscamos um local aberto onde ele pudesse ser submetido a diversas variações de temperatura, vento e umidade e ao mesmo tempo possuímos um controle dessas características em tempo real. Em parceria com o Prof. Dr. Gustavo Rojas, da Universidade Federal de São Carlos, encontramos um local ideal, a uma certa altura do chão e sem prédios muito próximos, dentro da UFSCar. As características climáticas são controladas através de uma estação meteorológica (INMET). Para realizar o teste de aderência utilizamos uma fita adesiva comum, com 2,5 cm de comprimento, a qual colamos em uma determinada posição do espelho. Passamos o dedo sobre a parte colada e puxamos verticalmente, tentando manter uma velocidade constante para o movimento. Dessa forma obtemos um resultado visual imediato para a quantidade de alumínio que é removido do espelho analisado. Este procedimento é um padrão internacional, descrito na ISO 9211-4, encontrado na referência. (1) Após a observação da fita, observamos os pontos removidos, classificando a amostra de acordo com o padrão de testes dos espelhos CTA. Os resultados dos testes mostrarão se é viável o desenvolvimento dos espelhos no Brasil.

Palavras-chave: Raios gama. Cherenkov. Espelhos.

Referências:

1 INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. **ISO 9211-4:** optics and optical instruments-optical coatings. Geneva: 2006.

IC7

Desenvolvimento de ferramentas computacionais para a análise da distribuição da luz na terapia fotodinâmica

FORTUNATO, Thereza Cury¹; STRINGASCI, Mirian Denise¹; FERREIRA, Dilley¹; KURACHI, Cristina¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
therezacury@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na atualidade, varias técnicas vem sendo desenvolvidas para o tratamento de lesões tumorais, e uma delas é a terapia fotodinâmica (TFD). A TFD, até o momento, tem se mostrado especialmente eficaz em tratamentos de câncer de pele, porém ainda tem alguns pontos a serem aperfeiçoados, como a dosimetria (definição dos parâmetros de tratamento) e o acoplamento da luz em tecidos biológicos. Devido ao fato do tecido biológico possuir características ópticas semelhantes a um meio turbido, existe uma grande complexidade em prever a propagação da luz que nele incide e, assim, determinar uma dosimetria de luz personalizada, apropriada e viável para o uso clínico. Neste trabalho, foram elaboradas três ferramentas computacionais para uso em dosimetria, com base em rotinas desenvolvidas no ambiente matemático MATLAB. A primeira foi utilizada para coleta e tratamento de emissão de luz de uma fibra difusora para iluminação intersticial em TFD, de modo a obter gráficos tridimensionais da distribuição de luz gerada pela fibra óptica. Na segunda parte, foi elaborada a reconstrução de uma lesão obtida através da iluminação da fibra difusora, a partir da soma de lesões geradas por elementos menores do difusor. Finalmente, foi realizado o tratamento de imagens fotográficas, de modo a atribuir classificação por intensidade dos pixels para determinação da dose de luz entregue em profundidade ao tecido fotografado.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Doseimetria. Ferramentas computacionais.

Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Novas técnicas ópticas para as áreas de saúde**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2008.

2 NIEMZ, M. H. **Laser-tissue interactions: fundamentals and applications**. 3rd. ed. Berlin: Springer, 2007.

IC8

Definição de novas variáveis temporais para o estudo de codificação em pequenas redes neurais

GUARIENTO, Rafael Tuma¹; BROCHINI, Ludmila¹; PINTO, Reynaldo Daniel¹

rafael.tuma.guariento@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Em trabalhos recentes (1), foi proposto um método para alinhar o RasterPlot dos diferentes bursts de um mesmo neurônio de um Centro Gerador de Padrões (CPG). Propomos utilizar a distância de cada potencial de ação de sua média alinhada como uma forma de estudar a dinâmica do neurônio bem como suas propriedades de codificação e processamento da informação. **Métodos e Resultados:** Utilizamos séries temporais de dados eletrofisiológicos de neurônios do Sistema Estomatogástrico (STG) de siris azuis *Callinectes sapidus*. Cada uma destas séries apresenta cerca de alguns milhares de bursts. Foram utilizadas, até o momento, 3 séries obtidas de animais distintos. A rede estudada possui um par de neurônios marca-passo que interagem por sinapses elétricas fortes. Estes neurônios inibem todos os demais componentes da rede e recebem somente uma sinapse química inibitória de feedback. Em nossas análises, utilizamos os dados de um destes neurônios do circuito marca-passo, o PD (Pyloric Dilator) e do neurônio que faz esta sinapse de retorno, o LP (Lateral Pyloric). A partir do método de alinhamento aplicado nestas séries temporais, e com ferramentas da Teoria da Informação (2) observamos como a distribuição de cada Potencial de Ação em torno de sua média influi na transmissão de informação entre os neurônios da rede. Utilizamos também estas variáveis como uma forma de caracterizar a dinâmica dos mesmos. Estes resultados são complementares a outros estudos acerca de transmissão de informação em CPGs, nos quais a Teoria da informação foi aplicada somente nos tempos precisos de disparo, sem a realização do alinhamento dos bursts. (3) **Conclusão:** O desenvolvimento desta nova metodologia para o estudo de neurônios bursters pode criar novas abordagens no estudo do problema de processamento de informação em pequenas redes neurais, fornecendo novas escalas temporais relevantes, como a resolução temporal na determinação do tempo preciso do disparo e o real papel da distribuição interna dos Potenciais de Ação de burst (Intra Burst Spike Patterns) em um CPG. Apoio Financeiro: CNPq e FAPESP

Palavras-chave: Neurociência. Teoria da informação. Centros geradores de padrões.

Referências:

- 1 LAGO-FERNÁNDEZ, L. F.; SZÜCS, A.; VARONA, P. Determining burst firing time distributions from multiple spike trains. **Neural Computation**, v. 21, n. 4, p. 973-990, 2009.
- 2 SHANNON, C. E. The mathematical theory of communication. 1963. **MD Computing**, v. 14, n. 4, p. 306-317, 1997.
- 3 BROCHINI, L.; CARELLI, P. V.; PINTO, R. D. Single synapse information coding in intra-burst spike patterns of central pattern generator motor neurons. **Journal of Neuroscience**, v. 31, n. 34, p. 12297-12306, 2011.

IC9

Configuração do arranjo de telescópios de luz Cherenkov para o CTA

LANG, Rodrigo Guedes¹; SOUZA, Vitor de¹

rodrigo.lang@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este projeto tem como objetivo participar dos esforços de configuração do arranjo de telescópios para o Cherenkov Telescope Array (CTA) Observatory, uma colaboração internacional que visa construir uma nova geração de telescópios terrestres sensíveis à radiação gama para estudar astrofísica de partículas cósmicas. O experimento, que terá 10 vezes mais sensibilidade que quaisquer dos telescópios de raios gama já existentes, encontra-se na fase de estudo das configurações e potencialidade. (2) Este projeto insere-se nestes esforços e busca, através de ferramentas matemáticas, otimizar o arranjo dos telescópios de forma a maximizar as potencialidades do Observatório e minimizar o custo de construção. Neste projeto foram utilizados métodos matemáticos e computacionais, para estudar analiticamente o problema e, através do método de Monte Carlo aliado a algoritmos desenvolvidos que visam a diminuição da energia da configuração, simular um sistema dinâmico entre um certo número de telescópios, buscando a posição otimizada destes. (1) Tal energia de configuração é analisada através de funções de trigger próprias dos telescópios, simuladas pelo Dr. Carlos Todero.

Palavras-chave: Radiação gama. Cherenkov. Otimização.

Referências:

1 HOWARD, A.; MATARIC, M.; SUKHATME, G. Mobile sensor network deployment using potential fields: a distributed, scalable solution to the area coverage problem. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON DISTRIBUTED AUTONOMOUS ROBOTICS SYSTEMS, 6., 2002, Fukuoka. **Proceedings...** Fukuoka: Kyushu University, 2002. DOI:10.1.1.12.8990 .

2 CTA Consortium. Design concepts for the Cherenkov telescope array: an advanced facility for ground-based high-energy gamma-ray astronomy. **Experimental Astronomy**, v. 32, n. 3, p. 193-316, 2011.

IC10

Síntese e processamento de cerâmicas ZrTiO_4 aplicadas em sensores de umidade

LIMA, Raquel de Castro Rodrigues¹; BONACIN, Rafael²; BERNARDI, Maria Inês Basso²
raquel.castro.lima@usp.br

¹Escola de Engenharia de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Sensores de umidade baseados em materiais cerâmicos têm seu funcionamento, a princípio, correlacionados com a capacidade de adsorção e absorção em relação ao ambiente de operação. (1) As influências microestruturais, no que diz respeito à distribuição e tamanho médio dos poros e das fases cristalinas componentes são, portanto, fundamentais. (2) O objetivo deste trabalho é a síntese e o processamento de cerâmicas ZrTiO_4 de alta porosidade, visando sua aplicação como elemento componente em sensores de umidade. A rota de síntese escolhida foi o método de precursores poliméricos (3), seguidos de tratamentos térmicos à 400°C e calcinação em 800°C. Obtendo assim um pó de baixa densidade e alta área superficial, produzindo-se através de uma compactação isostática em 100 MPa, pastilhas de 12 mm de diâmetro que foram então sinterizadas entre 1000 e 1200°C. As densidades das amostras obtidas foram aferidas através do método de Arquimedes. Os resultados obtidos através da difração de raios X (DRX) e a microscopia de varredura, mostram a obtenção ZrTiO_4 em sua fase ortorrômbica e alta porosidade, respectivamente.

Palavras-chave: ZrTiO_4 . Método de precursores poliméricos. Sensores de umidade.

Referências:

- 1 MULLA, I. S.; PRADHAN, S. D.; VIJAYAMOHANAN, K. Humidity-sensing behaviour of surface-modified zirconia. **Sensors and Actuators A**, v. 57, n. 3, p. 217-221, 1996 .
- 2 GRANDKE, T.; KO, W. H. Fundamentals and general aspects. In: GÖPEL, W.; HESSE, J.; ZEMEL, J. N. (Ed.). **Sensors: a comprehensive survey**. Weinheim: VCH, 1992. v. 1.
- 3 XIA, Y. N; ROGERS, J.A.; PAUL, K.E.; WHITESIDES, G.M. Unconventional methods for fabricating and patterning nanostructures. **Chemical Reviews**, v. 99, n. 7, p. 1823-1848, 1999.

IC11

Um estudo da transferência atômica entre duas armadilhas magneto-ópticas em um sistema de condensação de Bose-Einstein

MARINO, Áttis Vinícius Martines¹; TELLES, Gustavo Deczka¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
attis.marino@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A fim de melhorar a eficiência da transferência atômica entre duas armadilhas magneto-ópticas (MOT) pertencentes a um sistema de condensação de Bose-Einstein (BEC), faz-se necessário primeiro compreender plenamente o mecanismo de transporte, realizado por meio de um feixe laser (*push beam*) acoplado a uma das transições do átomo de ^{87}Rb . Este mecanismo pode ser demonstrado através de um modelo semi-clássico da pressão de radiação (1) agindo nos átomos dentro do campo de aprisionamento magneto-óptico da armadilha primária, que atua como uma fonte de átomos frios a serem transportados através de um feixe atômico, até serem recapturados na região de confinamento da armadilha secundária, dentro de uma câmara de vácuo ultra-alto (UHV). Uma vez que o mecanismo esteja estabelecido em termos de seus parâmetros, será realizada uma investigação de como melhor adaptá-los ao sistema em uso, o que permitirá tempos de carregamento mais rápidos e melhor qualidade do MOT de recaptura, levando a uma melhoria significativa nos resultados do experimento de condensação.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Transporte atômico. Átomos frios.

Referências:

1 WOHLLEBENA, W.; CHEVY, F.; MADISON, K.; DALIBARD, J. An atom faucet. **European Physical Journal D**, v. 15, n. 2, p. 237-244, 2001.

IC12

Evolução temporal do contraste em diferentes regiões cerebrais em imagens obtidas utilizando MEMRI

MARQUES, Márcia Renata Hidalgo¹; MALHEIROS, Jackeline Moraes²; PAIVA, Fernando Fernandes¹

marcia.renata.marques@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Paulo - UNIFESP

A técnica de Ressonância Magnética (RM) possibilita a obtenção de imagens de forma completamente não invasiva. Conferindo dados anatômicos e funcionais do cérebro, o exame de RM revolucionou a área de diagnóstico por imagem bem como a neurociência básica e aplicada. Dentre os mais recentes avanços na área de neuroimagem por RM podemos listar a técnica denominada *Manganese-Enhanced Magnetic Resonance Imaging* (MEMRI) que emprega íons de manganês como agente de contraste alternativo. O íon de manganês é conhecido por diminuir tanto o tempo de relaxação T1 como o T2 da água adjacente, sendo então, um excelente agente de contraste. A técnica MEMRI foi descrita há alguns anos para demonstrar o realce do contraste no cérebro de ratos, em estudos sobre o acúmulo de manganês e sua toxicidade. (1) Em particular, três aplicações principais se beneficiaram da técnica MEMRI (2-3): mapeamento de áreas ativas do sistema nervoso central; a delimitação de conexões neurais específicas no sistema nervoso central; a utilização como agente de contraste após administração sistêmica. Desta forma, MEMRI figura como um método único e útil para a visualização de circuitos neurais e identificação anatômica de estruturas encefálicas *in vivo*. Este projeto pretende caracterizar a evolução temporal do contraste gerado pelo acúmulo de manganês em estruturas cerebrais distintas. Estão sendo analisadas as regiões hipocámpicas (HPC) e do giro denteado (DG), que são regiões associadas ao processo de evolução das epilepsias. O presente projeto está sendo desenvolvido no CIERMag do IFSC-USP em um sistema de imagens por RM de 2.0T dedicado a estudos de pequenos animais. Inicialmente, os ratos recebem uma injeção intraperitoneal de MnCl₂. Em seguida, são anestesiados e imagens 3D-GRE ponderadas em T1 são adquiridas com alta resolução espacial. São obtidos oito conjuntos de dados com intervalo de 3h entre eles por um período de 24h. As imagens são analisadas utilizando ROIs independentes, desenhadas nas duas áreas de interesse. A análise preliminar dos dados mostra que nas duas regiões de interesse existe um aumento gradual no contraste obtido nas imagens ponderadas em T1 ao longo do tempo após a injeção do MnCl₂. No caso do DG, por exemplo, o primeiro ponto temporal apresenta intensidade de sinal menor que o obtido no músculo do animal mostrando ainda um acúmulo bem baixo do íon de Manganês na região. Muito embora nesse mesmo ponto temporal, o HPC já apresente sinal mais intenso que o músculo, com o passar das horas o sinal relativo no DG supera o obtido na região do HPC. Além disso, depois de 24h a região do HPC parece já ter atingido a máxima captação de íons de manganês, enquanto a curva da região do DG parece ainda estar evoluindo assintoticamente. Isso mostra que diferentes regiões cerebrais não apenas captam quantidades distintas do íon de Mn, como esse processo se dá em escalas temporais distintas, o que torna ainda mais importante a caracterização da metodologia para diferentes aplicações nas quais diferentes regiões cerebrais possam estar envolvidas.

Palavras-chave: MEMRI. Manganês. Regiões cerebrais.

Referências:

- 1 PAUTLER, R. G.; SILVA, A. C.; KORETSKY, A. P. In vivo neuronal tract tracing using manganese-enhanced magnetic resonance imaging. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 40, n. 5, p. 740-748, 1998.
- 2 ALVESTAD, S. et al. In vivo mapping of temporospatial changes in manganese enhancement in rat brain during epileptogenesis. **NeuroImage**, v. 38, n. 1, p. 57-66, 2007.
- 3 SILVA, A.C. et al. Manganese-enhanced magnetic resonance imaging (MEMRI): methodological and practical considerations. **NMR in Biomedicine**, v. 17, n. 8, p. 532-543, 2004.

IC13

Efeito da suplementação de selenito de sódio em culturas de *trypanosoma cruzi*

MORAES, Alan Raphael de Farias Klein¹; PORTAPILLA, Gisele Bulhões²; DA SILVA, Marco Tulio Alves³; THIEMANN, Otavio Henrique³
arfk.moraes@hotmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

²Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto - USP

³Instituto de Física de São Carlos - USP

A tripanossomíase americana, causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi* é uma Doença Tropical Negligenciada (DTN) que acomete aproximadamente 14 milhões de pessoas na América Latina e ainda não possui tratamento adequado ou vacina. O selênio é um micronutriente essencial na nutrição de animais e seres humanos que vem sendo estudado devido seu papel na prevenção da formação de radicais livres, prevenção e combate do câncer e modulação do sistema imune inato e adquirido. Os compostos de Se em baixas concentrações exercem efeitos benéficos, mas quando em altas concentrações, tornam-se tóxico ocasionando danos diversos nas células. A eliminação do selênio ocorre primariamente através das vias de metilação, onde o selênio é reduzido formando compostos mono, di e trimetilados que são dificilmente excretados. Os efeitos observados pela suplementação de Se *in vitro* e *in vivo* mostram que para alguns micro-organismos patogênicos o Se pode ser um modulador de virulência para o patógeno. Em experimentos com camundongos infectados com *T. cruzi*, a deficiência em Se do hospedeiro levou a um aumento da virulência do protozoário. (1) Já a suplementação com Se reduziu o número de formas infectantes em circulação e diminuiu os danos inflamatórios no músculo cardíaco. (2) Este trabalho tem como objetivo verificar qual a influência do selênio no metabolismo do *T. cruzi*, avaliando o efeito desde a suplementação até os efeitos tóxicos decorrentes de elevadas concentrações de selênio. Observou-se considerável redução da viabilidade de formas epimastigota com concentrações de 100, 50 e 10 μ M de selenito de sódio, e não houve alteração do crescimento para 1 μ M. Surpreendentemente, a suplementação com 100 nM de selenito de sódio ocasionou aumento de até 40 por cento da viabilidade quanto comparada ao controle. Ocorreu redução da viabilidade de formas tripomastigotas nas concentrações testadas (10, 1, 0,1 μ M), indicando formas sanguíneas são sensíveis a presença de selênio. Estudos com formas amastigotas, cultivadas com auxílio de fibroblastos humanos, demonstraram que a suplementação de selenito de sódio causa incremento de aproximadamente 35 por cento no número das formas intracelulares de *T. cruzi*, embora nas mesmas concentrações não seja observado alteração no crescimento da célula de mamífero utilizada. Somados, os dados sugerem diferenças no metabolismo de selênio em diferentes formas de *trypanosoma* e pretende-se avaliar a influência da suplementação de selenito de sódio na expressão de selenoproteínas (3) tanto do hospedeiro quanto do parasito.

Palavras-chave: *Trypanosoma cruzi*. Selênio. Viabilidade e toxicidade.

Referências:

1 de SOUZA, A. P. et al. *Trypanosomacruzi* - host selenium deficiency leads to higher mortality but similar parasitemia in mice. **Experimental Parasitology**, v. 101, n. 4, p. 193-199, 2002.

2 de SOUZA, A. P. et al. Selenium supplementation at low doses contributes to the decrease in heart damage in experimental *Trypanosoma cruzi* infection. **Parasitology Research**, v. 91, n. 1, p. 51-54, 2003.

3 LOBANOV, A. V. et al. Selenium metabolism in *Trypanosoma*-characterization of selenoproteomes and identification of a Kinetoplastida-specific selenoprotein. **Nucleic Acids Research**, v. 34, n.14, p. 4012-4024, 2006.

IC14

Desenvolvimento de sensores para monitoramento de microrganismos

NOGUEIRA, Marcelo Saito¹; KURACHI, Cristina¹

marcelosaitonogueira@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O desenvolvimento de sensores para monitoramento de microrganismos integra conhecimentos de biologia molecular e tecnologia de informação. No presente projeto, realizamos a montagem e a caracterização de um sensor idealizado para monitoramento rápido de sistemas biológicos. O sensor proposto deve ser capaz de distinguir amostras de meios de cultura com condutividades elétricas diferentes, em função das concentrações de substâncias dissolvidas. Para descobrir se o sensor é útil na detecção de microrganismos, vão ser estabelecidas curvas-padrão de crescimento para algumas espécies e descobrir se há algum tipo de assinatura elétrica característica para cada grupo que poderia ser identificada pelo sensor. O sensor utilizado para medições com substâncias dissolvidas é um circuito divisor de tensão, em que um dos ramos é um resistor conhecido e o outro é a ponteira de medição. Os formatos de ponteiras testadas foram cilindros concêntricos, placas paralelas e hastes paralelas. As medições para variação de tensão de amostras em meio líquido se assemelham às de carregamento de um capacitor com uma resistência associada. Para obter os dados automaticamente, foi usado um sistema de aquisição de dados, composto por uma placa de aquisição PCI-MIO-16E-4 e pelo programa Labview, ambos da National Instruments. A variação da tensão obtida para um sistema com oito elementos sensores, em medições simultâneas, é muito similar. Antes de realizar medições com microrganismos, é necessária a realização de ensaios com amostras líquidas, com a escolha de substâncias dissolvidas e das respectivas concentrações em condições controladas, para fins de caracterização e calibração do sensor. As primeiras medições com amostras não biológicas foram da variação de tensão, e por consequência da condutividade, da amostra após aplicação de uma tensão elétrica externa. Foram usadas amostras de água destilada, de soluções de açúcar a 10, 150 e 300 mg/ml, e soluções de ácido acético a 0,97%, 1,94% e 4,85%. Para medições com amostras biológicas, foram utilizadas células neoplásicas do tipo MDA, cultivadas em garrafas de 75 cm² até atingir 100% de confluência. O meio foi removido e as células são lavadas com PBS estéril, adicionando-se meio com tripsina em seguida. Após corar as células com azul de tripan, a contagem e verificação da viabilidade das células foram feitas num microscópio em câmara de Neubauer. Até o momento, conseguimos calibrar o sistema e os resultados obtidos em cultura de células neoplásicas. O sistema será futuramente utilizado em culturas microbianas. O comportamento esperado para amostras de microrganismos é que diversas substâncias presentes no meio de cultura tenham suas concentrações alteradas, o que poderia mudar a resposta elétrica desse meio. Para evitar que a passagem de corrente elétrica altere a amostra, como mostrado em (1-2), o circuito contruído levou em conta a quantidade de corrente elétrica usada e o tempo do processo de medição. O trabalho vem sendo desenvolvido juntamente com o aluno de mestrado Marcel Tenório Bezerra e teve materiais fornecidos pela pós-doutoranda Natália Mayumi Inada.

Palavras-chave: Sensor. Condutividade. Microrganismos.

Referências:

1 LIU, W. K ; BROWN, M. R.; ELLIOTT, T. S. Mechanisms of the bactericidal activity of low amperage electric current (DC). **Journal Antimicrobiology Chemotherapy**, v. 39, n. 6, p. 687-695, 1997. DOI:10.1093/jac/39.6.687.

2 LIU, Wai-Kin ; TEBBS, Sarah E.; BYRNE, Philip O.; ELLIOTT, Thomas S.J. The effects of electric current on bacteria colonising intravenous catheters. **Journal of Infection**, v.27, n.3, p. 261-269, Nov. 1993.

IC15

Emprego da terapia fotodinâmica na descontaminação bucal

PARMESANO, Thiago Nogueira¹; LIZARELLI, Rosane de Fátima Zanirato²; BAGNATO, Vanderlei Salvador²
parmesano@ifsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Nota-se que nos últimos anos houve significativo aumento do número de microrganismos resistentes aos convencionais métodos de controle microbiano, tornando assim, cada vez mais necessário a busca por novas metodologias alternativas e mais eficazes. Com este intuito, tem surgido a terapia fotodinâmica (PDT), uma nova abordagem minimamente invasiva, comprovadamente eficaz, que baseia-se no emprego de três elementos, sendo eles o oxigênio, um composto fotossensível aliado a uma fonte de luz de comprimento de onda adequado. Quando estes elementos são combinados ocorre a geração de espécies reativas capazes de interagir com a fauna microbiana levando a inativação dos mesmos na região aplicada. Neste trabalho clínico com fases associadas a estágios *in vitro*, onde através da utilização de técnicas de cultivo microbiológico a partir da obtenção de alíquotas de salivas de pacientes que foram plaqueadas em meios de cultura em estágios anteriores a aplicação, imediatamente após o tratamento, após trinta minutos e vinte e quatro horas após, tendo como objetivo a verificação da capacidade da técnica em inativar os microrganismos bem como monitorar a capacidade de recolonização dos mesmos.

Palavras-chave: Descontaminação. Fotossensibilizador. Microrganismos.

Referências:

- 1 HAAMBLIN, M. R.; HASAN, T. Photodynamic therapy: a new antimicrobial approach to infectious disease. **Photochemical and Photobiological Sciences**, v. 3, n. 5, p. 436-450, 2004.
- 2 TAKASAKI A. A.; AOKI, A.; MIZUTANI, K.; SCHWARZ, F.; SCULEAN, A.; WANG, C. Y.; KOSHY, G.; ROMANOS, G.; ISHIKAWA, I.; IZUMI, Y. Application of antimicrobial photodynamic therapy in periodontal and peri-implant diseases. **Periodontology** 2000, v. 51, n.1, p. 109-140, 2009.
- 3 CHONDROS, P. et al. Photodynamic therapy as adjunct to non surgical periodontal treatment in patients on periodontal maintenance: a randomized controlled clinical trial. **Lasers in Medical Science**, v. 24, n. 5, p. 681-688, 2009.

IC16

Caracterização de estado sólido do cocrystal de oxalato de dietilcarbamazina

PEPINO, Rebeka de Oliveira¹; SILVA, Cecília Carolina Pinheiro da²; ELLENA, Javier Alcides²

rebeka@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

A filariose trata-se de uma doença negligenciada e endêmica que atinge 83 países, sendo seu tipo mais comum a filariose linfática (FL), considerada pela Organização Mundial da Saúde como erradicável. Para o seu tratamento, desde 1950 tem sido amplamente utilizado o fármaco citrato de dietilcarbamazina (DEC-CIT), tanto na forma de comprimidos quanto misturado ao sal de cozinha. (1) A DEC-CIT é preferida, pois a forma de DEC livre é instável em temperaturas ambientes. Estudos estruturais reportados na literatura revelaram a existência de transições de fase sólido-sólido a baixa temperatura para o DEC-CIT. (2) Assim, visando o aperfeiçoamento farmacológico do fármaco DEC-CIT, nesse trabalho desenhou-se um cocrystal de oxalato de DEC (coc-DEC-OX). (3) Cristais adequados à realização de experimentos de difração de raios x de monocristal (DRXM) foram obtidos a partir de uma mistura equimolar de ácido oxálico e DEC, numa solução de isopropanol e água. Os dados de difração foram coletados em um difratômetro APEX II Duo instalado nas dependências do Instituto de Física de São Carlos. Os dados foram coletados tanto a temperatura ambiente quanto 100K. Estes dados mostraram a ausência de transições de fase sólido-sólido para este cocrystal. A análise estrutural mostrou que a unidade assimétrica é composta por uma molécula de DEC e duas moléculas de ácido oxálico, uma ionizada (responsável pela constituição do novo sal) e outra não ionizada (que caracteriza a formação de um cocrystal). Essa particularidade, além de ser interessante, levou a um empacotamento diferencial e único, já que o coc-DEC-OX é a primeira forma sólida da DEC a apresentar empacotamento cristalino com a formação de canais. Nestes canais se abrigam moléculas do ácido tanto ionizadas quanto não-ionizadas. Estas moléculas de agente co-cristalizante estão fortemente ligadas por ligações de hidrogênio clássicas do tipo O—H—O. Assim, as moléculas de ácido formam colunas compostas por moléculas ionizadas e não ionizadas alternadas. Estas colunas dão uma importante rigidez ao empacotamento cristalino que resulta num importante aumento no ponto de fusão do composto, em torno de 190°C (determinado por microscopia óptica polarizada térmica), quando comparado com a DEC-CIT (140°C). Estas análises sugerem que o sal de dietilcarbamazina aqui reportado apresenta uma estabilidade superior à da forma sólida administrada atualmente. Esta informação sugere que este novo sal seria mais útil na administração diária misturado ao sal de cozinha, em lugar do DEC-CIT.

Palavras-chave: Dietilcarbamazina. Cocrystal. Estrutura cristalina.

Referências:

1 DREYER, G.; NORÕES, J. Dietilcarbamazina no tratamento da filariose bancroftiana. **Revista da Sociedade Brasileira de Medicina Tropical**, v. 30, n. 3, p. 229-240, 1997.

- 2 SILVA, C. C. P.; MARTINS, F. T.; HONORATO, S. B.; BOECHAT, N.; AYALA, A. P.; ELLENA, J. Triple structural transition below room temperature in the antiparasitic drug diethylcarbamazine citrate. **Crystal Growth and Design**, v. 10, n. 7, p. 3094-3101, 2010.
- 3 BERSTEIN, J. **Polymorphism in molecular crystals**. Oxford: Oxford University Press, 2002. 410p.

IC17

Modelo teórico para dose limiar e profundidade de necrose em terapia fotodinâmica com fonte de espectro amplo

REQUENA, Michelle Barreto¹; PRATAVIEIRA, Sebastião²; VOLLET-FILHO, José Dirceu²; BAGNATO, Vanderlei Salvador²
michelle@rc.unesp.br

¹Universidade Estadual Paulista - UNESP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma técnica utilizada para o tratamento de diversos tipos de lesões, como câncer, no controle microbiológico, em casos odontológicos e estéticos. A realização da TFD consiste no uso de um fotossensibilizador (FS), que ficará localizado principalmente nas células neoplásicas e será irradiado com luz visível. Este processo, quando ocorre na presença de oxigênio, desencadeia a formação de espécies reativas de oxigênio, que são citotóxicas para as células. Estas espécies provocam a morte celular e subsequente necrose tumoral. A utilização da luz branca como fonte de luz multiespectral para Terapia Fotodinâmica e suas consequências ao efeito fotodinâmico ainda não são completamente estabelecidas, e por isso há interesse no estudo dos parâmetros envolvidos para análise das melhores condições de aplicação do tratamento. O objetivo do trabalho é a elaboração de um modelo que calcule a dose limiar em função do comprimento de onda e estime a profundidade de necrose obtida por TFD, escolhidos fotossensibilizador, fonte de luz e tecido. Dose limiar (do inglês, *Threshold Dose*, *Dth*) é a mínima dose de energia entregue ao tecido para causar uma necrose permanente. Encontra-se na literatura o valor da dose limiar estimado experimentalmente para alguns comprimentos de onda (1). Entretanto, ao utilizar uma fonte de espectro amplo, é fundamental conhecer o comportamento em função do comprimento de onda. Utilizamos no modelo o número mínimo de fótons necessários para produzir necrose tecidual (que é bem determinado na literatura, que é da ordem de 10^{19} fótons/cm³ (2) e foi estabelecida uma relação com os comprimentos de onda de absorção do FS. Nos experimentos de TFD, observa-se apenas um intervalo típico de valores de necrose (da ordem de milímetros), independente da fonte ser monocromática ou de espectro amplo. Segundo a teoria de *Dth*, expressa em fótons, isso se justifica pois, para uma fonte de espectro amplo, a molécula de FS absorverá o equivalente à sua dose limiar, independente do comprimento do onda dos fótons absorvidos. Então, pela Lei de Beer-Lambert, consideramos como a intensidade de luz em cada comprimento de onda é atenuada no tecido ao longo da profundidade. Calculou-se a intensidade absorvida, isto é, quanto da luz que chega a cada profundidade do tecido é realmente absorvido pelo FS, que foi convertida para o número de fótons absorvido pelo FS no tecido em função da profundidade. Este número foi associado com o *Dth* em fótons e, assim, estimou-se a mínima profundidade de necrose produzida. O trabalho está em andamento; o modelo obtido está sendo comparado com resultados experimentais da literatura.

Palavras-chave: Modelo. Terapia fotodinâmica. Luz branca.

Referências:

1 FERRAZ, R. C. M. C.; FERREIRA, J.; MENEZES, P. F. C.; SIBATA, C. H.; SILVA JUNIOR, O. C.; BAGNATO, V. S. Determination of threshold dose of photodynamic therapy to measure superficial necrosis. **Photomedicine and Laser Surgery**, v. 27, n. 1, p. 93-99, 2009.

2 PATTERSON, M. S.; WILSON, B. C.; GRAFF, R. In vivo tests of the concept of photodynamic threshold dose in normal rat-liver photosensitized by aluminum chlorosulfonated phthalocyanine. **Photochemistry and Photobiology**, v. 51, n. 3, p. 343-349, 1990.

IC18

Síntese e dinâmica espectral de nanofilmes poliméricos com diferentes arquiteturas de band gap

RIMOLI, Caio Vaz¹; MIRANDA, Paulo Barbeitas¹

cvrimoli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O domínio dos princípios físicos que regem a conversão de energia luminosa em trabalho útil, como, por exemplo, na forma de corrente elétrica, é fundamental para o planejamento de novos materiais, podendo abranger aplicações que vão desde os modernos dispositivos optoeletrônicos (células solares, etc) até a descoberta de novos processos bioquímicos da fotossíntese. (1) Neste contexto, a Espectroscopia de Bombeio-e-Prova, EBP (Pump-Probe Spectroscopy, PPS) é uma técnica capaz de medir o tempo de vida ultracurto (fs-ns) dos níveis de energia (radiativos ou não) de diversos materiais, inclusive de nanofilmes poliméricos, possibilitando, portanto, a análise da dinâmica do espectro quando ocorre transferência de carga ou de energia entre materiais (nanofilmes) independentemente se há luminescência ou não. (2) O aluno de iniciação científica (ic) é orientado pelo Prof. Dr. Paulo Barbeitas Miranda e tem como projeto geral auxiliar na implementação de uma estação experimental de EBP no Grupo de Polímeros "Bernhard Gross", comparar dois modos distintos de aquisição de dados (uma tradicional usando Lock-In Amplifier (LIA); outra, a aquisição "inovadora", sem usar LIA) e sintetizar amostras poliméricas para depois interrogá-la usando EBP. Este trabalho consiste em apresentar a síntese de nanofilmes poliméricos de PPV/PSS [poli(p-fenileno vinileno)/ poli(4-estireno sulfonato de sódio)] com diferentes tamanhos de conjugação e o uso da técnica de Espectroscopia de Bombeio-e-Prova para a análise da dinâmica energética destas heteroestruturas. (3) Observação: durante o trabalho, o aluno estagiou no Center For Nano Science and Technology, CNST, em Milão para se aprofundar em EBP e investigar dois tipos de amostra: as de PPV/PSS e outra de PPV/PFO (poli fluoreno). Esta última foi gentilmente doada pelo Prof. Dr. Francisco Eduardo Gontijo Guimarães, visando verificar o fenômeno de Transferência de Energia Ressonante de Forster (FRET) do PPV para o PFO. Na apresentação, o ic vai usar o dado deste fenômeno coletado no CNST para dar uma breve explicação sobre como interpretar a transmitância diferencial - a grandeza medida no experimento de Pump-Probe Spectroscopy. No momento, o aluno está finalizando a síntese de novas amostras de PPV/PSS. Espera-se que até a data de apresentação ele tenha resultados deste experimento. Apoio financeiro: FAPESP e CNPq.

Palavras-chave: Pump-Probe spectroscopy. Heteroestruturas de band gap. Polímeros.

Referências:

1 CORNING. **A day made of glass... made possible by corning**. Disponível em: <http://www.youtube.com/watch?v=6Cf7IL_eZ38>. Acesso em: 16 ago. 2012.

2 LANZANI, G.; CERULLO, G.; POLLI, D.; GAMBETTA, A.; ZAVELANI-ROSSI, M.; GADERMAIER, C. Photophysics of conjugated polymers: the contribution of ultrafast spectroscopy. **Physica Status Solidi A**, v. 201, n. 6, p. 1116-1131, 2004.

3 FAVARIM, H. R. **Estudo dos processos fotofísicos em heteroestruturas orgânicas que utilizam chaveamento de luz por fotoalinhamento molecular**. 2006. 127 p. Dissertação (Mestrado em Ciências - Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.

IC19

Avaliação de teor de carbono de solos utilizando a técnica LIBS

ROMANO, Renan Arnon¹; VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro²; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira²; SANTOS, Cleber Hilário dos³
renan.romano@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

³Instituto de Química de São Carlos - USP

Nos últimos anos o estudo de solos tem ganhado grande destaque devido à crescente preocupação com a qualidade do meio ambiente e as mudanças climáticas globais. O solo é um dos mais importantes reservatórios de carbono da Terra. Desta forma, pode auxiliar na absorção de carbono e na redução da concentração de gases de efeito estufa na atmosfera. (1) Essa preocupação incentiva o estudo não só do teor de carbono e da matéria orgânica como tantas outras propriedades físicas e químicas do solo. A sua formação é uma ação combinada de processos químicos, físicos e biológicos tais como: clima, material de origem, organismos, tempo e relevo. A ordem e intensidade desses fatores determinam o tipo de solo. (2) Além de suporte, o solo fornece às plantas alguns elementos essenciais para seus ciclos de vida, dentre eles, água e nutrientes. Conhecendo o teor de carbono, pode-se inferir propriedades químicas e biológicas que ocorrem no solo, como por exemplo, o acúmulo de nutrientes e a taxa de retenção de água, podendo assim diferenciar manejos distintos. Para as análises do teor de carbono, a prática mais comum é a amostragem de determinada quantidade de solo e o envio da amostra a um laboratório especializado. Esta análise não só tem custo elevado como também não possibilita mapear uma região, já que é feita uma média de apenas alguns pontos. No laboratório, a amostra é submetida a um pré-tratamento, etapa da sequência analítica apontada como a mais lenta e complicada. Durante este processo, há grande probabilidade de introdução de erros sistemáticos devido às contaminações, uma vez que esta é a etapa que requer maior manipulação da amostra. Por esses motivos, à etapa de preparo são atribuídos os maiores prejuízos relacionados à precisão e exatidão dos resultados analíticos. A fim de tornar esse conhecimento mais rápido, prático e possibilitar análises in situ, ou seja, sem a necessidade de transporte e manipulação das amostras com reagentes químicos, foi utilizada a técnica LIBS (acrônimo do inglês Laser Induced Breakdown Spectroscopy) e métodos estatísticos multivariados para avaliar a possibilidade de medir o teor de carbono do solo. LIBS é uma técnica espectroanalítica que utiliza plasma gerado por pulsos de laser de alta energia para preparar a amostra e excitar os analitos em um único passo. (3) Esta técnica em conjunto com métodos estatísticos foi capaz de inferir o teor de Carbono do solo, tendo alta correlação com a técnica de referência de análise elementar (CHN). Na mesma medida, é possível também identificar outras características do solo, como, por exemplo, a quantidade de nutrientes e de contaminantes. Outra vantagem desta técnica é que ela permite mapear várias características de uma região em pouco tempo sem gerar resíduos.

Palavras-chave: Teor de carbono. Espectroscopia de plasma induzido por laser. Solo.

Referências:

- 1 BOT, A.; BENITES, J. **The importance of soil organic matter**: key to drought-resistant soil and sustained food and production. FAO Soils Bulletin, 2005. Disponível em: <<ftp://ftp.fao.org/agl/agll/docs/sb80e.pdf>>. Acesso em: 11 ago. 2012.
- 2 GOLBERG, P.; MACPHAIL, R. I. **Practical and theoretical geoarchaeology**. Malden: Blackwell Publishing Oxford, 2006.
- 3 SANTOS JUNIOR, D., TARELHO, L. V. G., KRUG, F. J., MILORI, D. M. B. P., MARTIN NETO, L.; VIEIRA JUNIOR, N. D. Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por laser (LIBS) - fundamentos, aplicações e perspectivas. **Revista Analytica**, n. 24, p. 72-81, ago./set. 2006.

IC20

Introdução a teoria quântica de campos e efeitos não lineares em fluidos quânticos

SANTOS, Millena Logrado dos¹; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves¹

millena.santos@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os métodos perturbativos são fundamentais na análise de problemas mais realísticos em termos das soluções idealizadas do mesmo problema, como é o caso da análise de um fluido bosônico interagente que apresenta infinitos graus de liberdade. Nesse trabalho faremos uma análise de um número N de osciladores harmônicos acoplados em estados estacionários e com condições de contorno de Dirichlet. É observado, então, que o espectro desse modelo é equivalente ao de um sistema de bósons livres. Na solução discreta deste sistema aplica-se o limite termodinâmico (número infinito de partículas) e também o limite contínuo (distância nula entre as partículas). Nesse contexto, passamos a trabalhar com uma corda quântica, que possui infinitos graus de liberdade. Conhecido, por fim, o espectro desse novo sistema, podemos analisar os efeitos anarmônicos através da adição de termos perturbativos não lineares, que nos levam a processos de espalhamento e resultam em características importantes sobre a função espectral.

Palavras-chave: Introdução a teoria de campos. Osciladores quânticos acoplados. Efeitos não lineares.

Referências:

1 PESKIN, M. E., SCHROEDER, D. V. **An introduction to quantum field theory**. Reading: Addison-Wesley Publishing, 1995.

2 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum mechanics**. New York: Wiley, 1977. 2 v.

3 GOLDSTEIN, H. **Classical mechanics**. 2nd ed. Reading: Addison-Wesley Publishing, 1980.

IC21

Clonagem, expressão e estudos estruturais do domínio GT-Pase de septinas de *Schistosoma mansoni*

SANTOS, Yuri Volpato¹; ZERAIK, Ana Eliza¹; DE MARCO, Ricardo¹

yurivolpato@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As septinas são um grupo evolucionariamente conservado de proteínas com muitas funções relacionadas ao ciclo celular. Estão associadas à citocinese, morfologia celular, polaridade neuronal e tráfico de vesículas em uma grande quantidade de organismos.(1) Estudos in vitro demonstraram que estas proteínas podem ligar e hidrolisar GTP e dessa forma formar biopolímeros.(2) Devido a essa característica, as septinas são enquadradas na superfamília das GTPases. Este projeto trata dos estudos estruturais e da caracterização biofísica de septinas de *Schistosoma mansoni*, agente etiológico da esquistossomose, doença tropical negligenciada que afeta aproximadamente 200 milhões de pessoas em 74 países.(1) Através de análises bioinformáticas verificamos que *S. mansoni* possui quatro genes que codificam septinas, os quais são denominados Smspt 5, Smspt10, Smspt7.1 e Smspt7.2 devido à similaridade com as septinas humanas 5, 10 e 7, respectivamente. Neste projeto foi estudado o domínio GT-Pase das septinas 5 e 10 do referido helminto, denominadas assim Smspt5G e Smspt10G. Inicialmente amplificou-se os genes relativos aos domínios por RT-PCR. Em seguida esses genes foram clonados e subclonados nos respectivos vetores de propagação e expressão pJET1.2/blunt e PET28a(+), sendo realizado um sequenciamento entre estas duas etapas. A expressão foi realizada a 18°C com 0,4 mM de IPTG por 16 horas. Realizou-se a purificação do produto recombinante por cromatografia de afinidade em coluna de Ni-NTA, seguida por purificação em cromatografia por exclusão molecular em coluna Superdex 200-10/30 GL. A estrutura secundária das proteínas obtidas foi avaliada por dicroísmo circular utilizando-se um espectômetro Jasco 815 e a atividade das proteínas foi avaliada quanto à capacidade destas em hidrolisarem GTP a GDP por meio cromatografia de troca iônica, em coluna de troca aniônica DEAE 5 PW. Os ensaios de cristalização foram realizados pelo método de difusão de vapor, utilizando-se a gota suspensa. As proteínas foram expressas de forma solúvel e purificadas com sucesso. A análise dos espectros de dicroísmo circular permitiu identificar enovelamento em termos de estrutura secundária com a presença de estruturas organizadas do tipo alfa-helice e folha-beta sugerindo que estas macromoléculas encontrava-se na sua forma nativa. O teste de atividade realizado por cromatografia de troca iônica revelou que Smspt5G possui ação hidrolítica sobre o GTP e pode hidrolisar todo o nucleotídeo adicionado em um período de 4h. Entretanto o domínio Smspt10G não apresentou tal atividade, nem mesmo após 24h de incubação. Os ensaios de cristalização nos permitiram obter condições que propiciaram a formação de cristais de Smspt10G ligada a GDP e também a GTP. A estrutura de ambas estas configurações foi resolvida pelo método da substituição molecular. Os cristais difrataram a 1,9 Å para Smspt10G+GDP e a 2,1 Å para Smspt10G+GTP. Ao analisarmos a estrutura tridimensional das duas configurações percebemos que a proteína não sofreu alterações consideráveis em sua forma espacial ao ter seu ligante substituído. O presente trabalho permitiu elucidar aspectos estruturais e funcionais dos domínios GTPase estudados. Estas informações virão acrescentar importantes informações de base no estudo das septinas como um todo.

Palavras-chave: Septinas. *Schistosoma mansoni*. Estrutura e função de proteínas.

Referências:

- 1 VERJOVSKI-ALMEIDA, S. et al. Transcriptome analysis of the acelomate human parasite *Schistosoma mansoni*. **Nature Genetics**, v. 35, n. 2, p. 148-157, 2003.
- 2 BARRAL, Y.; KINOSHITA, M. . Structural insights shed light onto septin assemblies and function. **Current Opinion on Cell Biology**, v. 20, n. 1, p. 12-18, 2008.

IC22

Clonagem, expressão e purificação de diguanilato ciclases bacterianas para estudos estruturais e desenvolvimento de inibidores

SILVA, Everton Edésio Dinis¹; WIGGERS, Helton José¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹
everton.edesio.silva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Algumas diguanilato ciclases (DGCs) catalizam a formação c-di-GMP enquanto outras são receptoras desse segundo sinalizador. Altas concentrações intracelulares de c-di-GMP estimula a maquinaria bacteriana para o fenótipo colonial, mais conhecido como biofilme. (1) Características como grau de virulência, adesão em materiais de uso médico (lentes de contato ou implantes) ou de uso industrial (tubulações metálicas) são dependentes das rotas de sinalização do biofilme e exemplificam a atratividade em estudá-las. O trabalho tem como meta o desenvolvimento de protocolos de expressão e purificação de proteínas da família GGDEF de diferentes bactérias, a análise da atividade catalítica das proteínas em estudo - através de técnicas espectrofotométricas e cromatográficas - além da reprodução de um protocolo de obtenção enzimática da molécula c-di-GMP para estudos de interação com DGCs. Inclui também estudos estruturais, com a aplicação de ensaios em cristalografia dessas proteínas, etapa envolvida em um outro plano de pesquisa por moléculas potenciais inibidoras da família de proteínas de DGC. As DGCs XAC2810, XAC2482, XAC0614, XAC1992 - proteínas de *Xanthomonas axonopodis*, JW1528 (ou YdeH) - proteína de *Escherichia coli* e PA14_45930, PA14_23130, PA14_53310 - proteínas de *Pseudomonas aeruginosa*, foram clonadas em vetor de expressão pETSUMO e submetidas a testes de solubilidade bem sucedidos. Resultados experimentais comprovaram a atividade catalítica da DGC YdeH e um protocolo de purificação com esta enzima foi adaptado com êxito. (2) A proteína citada foi ainda submetida a screenig de soluções de cristalização e teve seus parâmetros cinéticos calculados. Dado que os cristais da YdeH foram obtidos com qualidade insuficiente para fornecer padrões de difração necessário aos estudos estruturais, investiu-se na clonagem e purificação da proteína WspR (3), que possui condições de cristalização e protocolos de purificação já bem estabelecidos. Isso ajudará na análise cristalográfica do complexo DGC com os inibidores desenvolvidos pelo pós-doutor Helton Wiggers, através de métodos em quimioinformática.

Palavras-chave: c-di-GMP. Biofilme. Diguanilato ciclases.

Referências:

- 1 TAMAYO, R.; PRATT, J. T.; CAMILLI, A. Roles of cyclic diguanylate in the regulation of bacterial pathogenesis. **Annual Reviews of Microbiology**, v. 61, p. 131-48, 2007.
- 2 ZÄHRINGER, F.; MASSA, C.; SCHIRMER T. Efficient enzymatic production of the bacterial second messenger c-di-GMP by the diguanylate cyclase YdeH from *E. coli*. **Applied Biochemistry Biotechnology**, v. 163, n. 1, p. 71-79, 2011.
- 3 DE N., PIRRUCCELLO, M.; KRASTEVA, P.V.; BAE, N.; RAGHAVAN, R.V.; SONDERMANN, H. Phosphorylation-independent regulation of the diguanylate cyclase WspR. **PLoS Biology**, v.6, n.3, p.67, 2008.

IC23

Diferença do efeito vascular em terapia fotodinâmica usando diferentes fotossensibilizadores

SILVA, Lucas Vale da¹; BUZZA, Hilde Harb¹; KURACHI, Cristina¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
lucastmbit@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A angiogênese é o nome dado ao fenômeno de formação de novos vasos sanguíneos e, portanto, se relaciona não só às funções normais do corpo, mas também diversas doenças. Quando esse fenômeno ocorre de forma descontrolada, torna-se crítico e tem um papel importante na formação de tumores sólidos e metástases. No entanto, na ausência de vascularização do tumor há um fenômeno de dormência dessa massa tumoral, descrito por Folkman em 1971.(1) A membrana córioalantóica de ovos de galinha, conhecido como CAM (do inglês, ChorioAllantoic Membrane), é um modelo in vivo extremamente eficiente para o estudo de diferentes atividades no endotélio vascular.(2) Um tipo de terapia não convencional que pode ser explorada nesse modelo é a Terapia Fotodinâmica (PDT do inglês, Photodynamic Therapy), técnica que consiste na interação entre luz, uma substância fotossensibilizada, a molécula é excitada, gerando oxigênio singlete, um produto citotóxico que leva à morte celular.(3) Esse projeto tem como objetivo avaliar o efeito vascular de diferentes fotossensibilizadores aplicando a técnica da terapia fotodinâmica, usando o modelo CAM. Com isso, espera-se contribuir para o tratamento de doenças como o câncer e entender sua relação com o fenômeno de angiogênese. Com o auxílio da captura e processamento de imagens, podemos obter dados qualitativos e quantitativos em função do tempo pós-terapia e relacioná-los às características biofísicas e bioquímicas dos fotossensibilizadores e sua interação com o ambiente.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Membrana córioalantóica. Fotossensibilizadores.

Referências:

- 1 FOLKMAN, J. Tumor angiogenesis: therapeutic implications. **New England Journal of Medicine**, v. 285, n. 21, p.1182-6. 1971.
- 2 STEINER, R. Angiostatic activity of anticancer agents in the chick embryo chorioallantoic membrane. **EXS**, v. 61, p. 449-454, 1992.
- 3 TRIESSCHEIJN, M.; BAAS, P.; SCHELLENS, J. H. M.; STEWART, F. A. Photodynamic therapy in oncology. **Oncologist**, v. 11, n. 9, p.1034-1044, 2007.

IC24

Produção de potenciais ópticos dinâmicos e arbitrários para o estudo de gases quânticos aprisionados

SILVA, Paulo Cesar Ventura da¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹

paulo.pc.vs@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nas últimas décadas, a física atômica e molecular sofreu grandes avanços com as técnicas de resfriamento de átomos. Em particular, uma das grandes conquistas foi a condensação de Bose-Einstein com gases confinados em potenciais espacialmente dependentes. A condensação foi alcançada graças ao desenvolvimento dos potenciais ópticos, que utilizam as forças de dipolo geradas por um feixe de laser para aprisionar átomos frios em uma região de interesse. (1) Recentemente, a possibilidade de produção de potenciais ópticos com formatos arbitrários e dinâmicos no tempo tem despertado o interesse dos pesquisadores em física atômica, sobretudo pelo poder de produzir Hamiltonianos com importantes aplicações no estudo de gases quânticos. Em nosso laboratório, estamos desenvolvendo um sistema de produção desses potenciais arbitrários e dinâmicos para ser aplicado em nosso experimento de condensação com átomos de rubídio. O método que usamos consiste em desviar um feixe de luz por meio de dois moduladores acusto-ópticos ortogonais. (2) Esses moduladores são controlados dinamicamente, e o feixe é projetado em um plano óptico, de modo a produzir um desenho em alta velocidade do potencial nesse plano. Com os equipamentos já produzidos, fomos capazes de observar figuras dinâmicas sobre um anteparo material, usando um laser simples para testes. Com os próximos avanços, pretendemos aperfeiçoar e caracterizar o sistema, para posteriormente aplicá-lo no aprisionamento de átomos de rubídio para a condensação. Os resultados abrirão novas possibilidades de pesquisas em nosso grupo, aprimorando o estudo de sistemas quânticos de muitos corpos.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Potenciais ópticos. Gases quânticos.

Referências:

- 1 GRIMM, Rudolf; WEIDEMÜLLER, Matthias. Optical dipole traps for neutral atoms. **Advances in Atomic Molecular and Optical Physics**, v. 42, Apr. 2008. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1049250X0860186X>>. Acesso em: 19 ago. 2012.
- 2 HENDERSON, K. et al. Experimental demonstration of painting arbitrary and dynamic potentials for Bose-Einstein condensates. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 4, Apr. 2009. Disponível em: <http://iopscience.iop.org/1367-2630/11/4/043030/pdf/1367-2630_11_4_043030.pdf>. Acesso em: 02 ago. 2012.

IC25

Aprisionamento de gases quânticos unidimensionais

Trapping one-dimensional quantum gases

SMAIRA, André de Freitas¹; CARACANHAS, Mônica Andrioli¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
andre.smaira@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos mais excitantes desenvolvimentos no estudo de gases atômicos ultra-frios consiste na observação dos vórtices. Isto porque os vórtices em Condensados de Bose Einstein constituem um dos maiores indícios da natureza quântica desse estado da matéria, já que representa a maneira particular dessa amostra manifestar o momento angular dos átomos nela incluídos. Nosso grupo recentemente foi pioneiro na observação desse fenômeno em gases quânticos alcalinos. Agora a parte de teoria está pesquisando mais sobre o assunto. O objetivo desse trabalho, é estudar o aprisionamento de uma espécie alcalina em vórtices de um condensado de outra espécie desse tipo. A princípio, foi estudada a dinâmica de apenas um gás interagente unidimensional aprisionado em dois diferentes potenciais (caixa e harmônico) e foi obtida a função de onda para cada caso. Em seguida, serão calculadas essas mesmas propriedades para o gás bidimensional e o estudo da interação entre dois gases unidimensionais será iniciada.

Palavras-chave: Superfluido. Condensado de Bose Einstein. Vórtices.

One of the most exciting study of ultra-cold atomic gases development is the observation of vortices. That is because vortices in Bose Einstein Condensates are one of the best signs of the quantum nature of this sample, since that it is the way to express the angular momentum of its atoms. Our research group recently was pioneer on the verification of quantum turbulence in alkali gases. Now, the theory part of our group is delving into studies of the properties of this phenomenon. In this work, we aim to continue our studies with the trapping of one alkaline condensed species in vortices of another condensed species. At first, we studied the dynamics of a one-dimensional interacting gas trapped in two different potentials (box e harmonic) and the wave function was calculated in each case. After that, those proprieties will be calculated for a two-dimensional quantum gas and the study of the interaction between two one-dimensional gases will be started.

Keywords: Superfluid. Bose Einstein condensate. Vortices.

Referências:

- 1 PETHICK, C. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- 2 MURUGANANDAM, P. ; ADHUKARI, S. K. Fortran programs for the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap. **Computer Physics Communications**, v. 180, n. 10, p. 1888-1912, 2009.
- 3 BAGNATO, V. S. A Condensação de Bose-Einstein. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 19, n. 1, p. 11-26, 1997.

IC26

Expressão e estudos estruturais do domínio GTPase da septina CrSept

SOUZA, Anacleto Silva de¹; ARAUJO, Ana Paula ¹; PINTO, Andressa Patricia Alves¹; MUNTE, Claudia Elisabeth¹
 anacletoasilvadesouza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As septinas são proteínas fundamentais para o processo de divisão celular em muitos organismos e são componentes essenciais do citoesqueleto, além de poderem estar envolvidas em outros processos celulares, como determinação da polaridade celular, reorganização do citoesqueleto, dinâmica de membranas, tráfego de vesículas, exocitose e apoptose. Entre os eucariotos, as septinas são encontradas desde leveduras até animais superiores, exceto em vegetais, sendo proteínas filogeneticamente conservadas. Estruturalmente, as septinas possuem um domínio conservado de ligação a GTP e pertencem a superclasse das *P-loop* GTPases. O *P-loop* é definido pelos motivos G1(GxxGxGKST), G3(DxxG) e G4(xKxD), este último específico para ligação ao GTP.(1) Os membros da família de septinas são compostos tipicamente por três domínios, um N-terminal variável, um domínio central GTPase, caracterizado pela presença do motivo *P-loop*, e uma região C-terminal que geralmente inclui sequências características *coiled-coil*.(2) Tratam-se de proteínas de 40-60 kDa, com estrutura primária bem conservada entre diferentes espécies. O domínio central GTPase é razoavelmente bem conservado (> 35% de identidade sequencial entre septinas homólogas de levedura e mamíferos), porém os domínios N- e C-terminais apresentam grande variação. (3) A identidade sequencial entre os domínios GTPases de septinas da mesma espécie é consideravelmente alto, com uma similaridade mínima de 75% (2). Considerando que *Chlamydomonas reinhardtii*, uma alga verde unicelular, apresenta uma única septina, ela se torna importante para estudos da formação de homofilamentos dessas proteínas. Conhecer o processo de formação de homofilamentos nesse organismo permitirá entender como essas proteínas trabalham e quais funções fundamentais estão associadas a elas. O objetivo desse trabalho foi produzir a septina de *Chlamydomonas* de forma heteróloga, caracterizá-la bioquimicamente e iniciar estudos de cristalização. A partir do gene *CrSept*, isolado de *C. reinhardtii* a região codificante do domínio GTPase foi amplificada por PCR (*primers* baseado na sequência de aminoácidos iniciada em K107 até G393). O produto desta reação foi inserido em um vetor de clonagem (pGEM), propagado em células *E. coli* DH5-alfa. Após confirmação da clonagem por análise de restrição e sequenciamento, o fragmento de DNA foi subclonado no vetor de expressão (pSUMO), nos sítios de Bam HI e Xho I. Esse vetor permite a expressão da proteína de interesse com uma proteína de fusão (SUMO), que aumenta a solubilidade da proteína, além de uma cauda de 6xHis, que possibilita a purificação da proteína recombinante por cromatografia de afinidade ao níquel. O vetor de expressão contendo o gene de interesse foi propagado em *E. coli* DH5-alfa e utilizado para transformação em bactérias *E. coli* Rosetta (DE3), sendo esta linhagem usada nos ensaios de expressão. Confirmada a expressão e solubilidade do produto, procedeu-se à purificação iniciada por uma cromatografia de afinidade em resina Ni-NTA, sendo a clivagem da proteína de fusão feita imobilizada na própria resina, através da adição da SUMO protease. A proteína foi eluída e submetida à cromatografia de exclusão molecular em coluna *Superdex 75* e posteriormente fez-se ensaios de cristalização de forma automática utilizando *kits* sob diferentes

condições em placas de gotas sentadas com três poços por condição variando-se tampão e pH.

Palavras-chave: Biologia molecular. Bioquímica. *Chlamydomonas reinhardtii*. Septina.

Referências:

- 1 WLOGA, D.; STRZYZEWSKA-JÓWKO, I.; GAERTIG, J.; JERKA-DZIADOSZ, M. Septins stabilize mitochondria in *Tetrahymena thermophila*. **Eukaryotic Cell**, v. 7, n. 8, p. 1373-1386, 2008.
- 2 KARTMANN, B.; ROTH, D. Novel roles for mammalian septins: from vesicle trafficking to oncogenesis. **Journal of Cell Science**, v. 114, n. 5, p. 839-844, 2001.
- 3 SARASTE, M.; SIBBALD, P. R.; WITTINGHOFER, A. The P-loop - a common motif in ATP - and GTP - binding proteins. **Trends in Biochemical Sciences**, v. 15, n. 11, p.430-434, 1990.

IC27

O aspecto geométrico da dinâmica de uma partícula

SOUZA, Iberê Oliveira Kuntz de¹; ONNIS, Irene Ignazia²

ibere.kuntz@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

Após o surgimento da física teórica, a matemática passou a realizar o papel fundamental de oferecer uma rica caixa, não só de ferramentas, mas também de conceitos para a física. Desde então, a relação simbiótica entre física e matemática foi se tornando cada vez mais estreita. Nos últimos anos, houve muito progresso nesse sentido e áreas mais avançadas e abstratas da matemática, como geometria e topologia, começou a ganhar espaço na ciência. Nesse ponto, vale a pena lembrar, por exemplo, da singela forma (uma única equação) que as equações de Maxwell assumem quando escritas no formalismo da álgebra de Clifford (ou álgebra geométrica), de onde observa-se de maneira precisa e clara que os campos elétrico e magnético são diferentes manifestações de uma mesma entidade física.(1) Nesse trabalho, abordarei o simples problema de estudar o movimento de uma partícula no espaço euclidiano $\mathbb{E}^3$ a partir do ponto de vista da geometria diferencial de curvas (2), estabelecendo dessa forma conexões entre grandezas físicas e geométricas.(3) Desta maneira, consideremos o vetor tangente $\mathbf{t}(s)$, o vetor normal $\mathbf{n}(s)$ e o vetor binormal $\mathbf{b}(s) \doteq \mathbf{t}(s) \times \mathbf{n}(s)$ definidos para todo parâmetro $s \in I \subset \mathbb{R}$ de uma curva diferenciável $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$, tal que $\alpha'(s) \neq 0$, $\forall s \in I$. A curvatura e a torção de tal curva são então definidas por $k(s) = \|\alpha''(s)\|$ e $\tau(s) = \langle \mathbf{b}'(s), \mathbf{n}(s) \rangle$, respectivamente. Intuitivamente, a curvatura mede o quanto uma curva se afasta de uma reta, enquanto que a torção mede o quanto uma curva se afasta de um plano (chamado de plano osculador). É ainda possível mostrar que a base ortonormal ordenada $\{\mathbf{t}(s), \mathbf{n}(s), \mathbf{b}(s)\}$, conhecida como referencial de Frenet da curva α no ponto s , satisfaz as fórmulas de Frenet da curva α no ponto s , que descrevem todo o comportamento local (isto é, em uma vizinhança do ponto s) de tal curva. Este trabalho consistiu em utilizar as fórmulas de Frenet para descrever o movimento de uma partícula em termos da curvatura e da torção da curva descrita pela sua trajetória. Com isso, é possível aprofundar a compreensão de alguns conceitos da mecânica e, além disso, mostrarei que o formalismo geométrico permite equacionar de maneira simples o problema de encontrar as condições que uma força deve satisfazer para que as órbitas por ela geradas sejam planas, o qual pelo tratamento convencional não seria claro.

Palavras-chave: Geometria. Frenet. Mecânica.

Referências:

- 1 PEREIRA JUNIOR, A. D.; LEMOS, N. A . Geometria diferencial de curvas e dinâmica da partícula. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 33, n. 2, p. 2306, 2011.
- 2 VAZ JUNIOR, J. A algebra geométrica do espaço Euclidean e a teoria de Pauli. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 19, n. 2, p. 234, 1997.
- 3 TENENBLAT, K . **Introdução à geometria diferencial**. 2. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 2008.

IC28

Clonagem, purificação e cristalização da septina humana: SEPT3

TANOUYE, Fernando Takeshi¹; MACEDO, Joci Neuby Alves¹; ARAUJO, Ana Paula Ulian¹

fernando.tanouye@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

As septinas são uma família de GTPases altamente conservadas em eucariotos. Em humanos existem 13 septinas que formam complexos e estruturas altamente organizadas, como filamentos e anéis. No entanto, são poucas as informações disponíveis na literatura sobre os fatores estruturais que governam a formação dessas estruturas. (1) Nesse estudo, objetivamos obter as estruturas cristalográficas de SEPT3G1 e SEPT3G2, duas versões truncadas da septina 3, complexadas com nucleotídeos (GDP, GTP e GMP-PNP) com a finalidade de obtermos informações das mudanças estruturais impostas pelos nucleotídeos e avaliar a importância delas na formação dos homofilamentos. As construções foram definidas com base nas estruturas resolvidas de SEPT3GC (2) e do homofilamento de SEPT2G, ambas complexadas com GDP. Elas demonstraram que as proteínas apresentam duas interfaces para formação dos homofilamentos: interface G (domínio GTPase) e interface NC (amino e carboxi-terminais). Além disso, o domínio C-terminal não se mostrou necessário para formar o filamento de SEPT2G. Então, as novas versões são basicamente SEPT3GC sem o domínio C-terminal (SEPT3G1), sendo que uma delas terá a região amino-terminal estendida para incluir uma hélice (SEPT3G2). As sequências codificadoras de SEPT3G1 e SEPT3G2 foram inseridas no plasmídeo de expressão pET28a e propagadas na linhagem Rosetta de *E. coli*, onde foi conduzida a indução da expressão das proteínas. SEPT3G1 e SEPT3G2 foram eficientemente expressas solúveis em bactéria, permitindo assim a realização dos procedimentos de purificação. A purificação das proteínas recombinantes foi realizada em duas etapas cromatográficas: inicialmente uma cromatografia de afinidade (Ni-NTA) seguida por uma cromatografia de exclusão molecular. A temperatura das amostras foi mantida sempre por volta de 4 graus para estabilizar as proteínas e evitar agregação. Observamos que as proteínas eluíram majoritariamente em um único pico na cromatografia de exclusão. Essas proteínas foram então analisadas por eletroforese em gel de poliacrilamida, onde observamos que a protease trombina foi eficiente na clivagem da cauda de histidina, cuja confirmação se deu pela diferença de migração das proteínas, e observamos também que as proteínas foram eluídas livres dos contaminantes provindos da cromatografia por afinidade. Os ensaios de cristalização começaram com triagem automática no robô HoneyBee 931 onde foram testadas 576 condições. As condições favoráveis foram refinadas manualmente, usando a técnica da gota suspensa. Os testes de cristalização foram realizados, até o momento, somente com a construção SEPT3G1, que cristalizou complexada com GMP-PNP. Os cristais foram levados para coleta de dados no European Synchrotron Radiation Facility (ESRF). Embora os cristais tenham difratado a 1,9 Ångström, alguns problemas foram identificados para a resolução da estrutura, como o fato deles terem se apresentado geminados. Como apresentado anteriormente tivemos sucesso tanto nas etapas de expressão, quanto de purificação e cristalização de SEPT3G1. Devido aos problemas encontrados na resolução estrutural, repetiremos as condições de cristalização para nova coleta de dados. Em paralelo iniciaremos também os ensaios de cristalização com SEPT3G2.

Palavras-chave: Septina. Estrutura. Biofísica.

Referências:

- 1 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.
- 2 MACEDO, J. N. A . **Estudos estruturais e funcionais de septinas humanas**: a ligação e hidrólise de GTP por SEPT3 e a busca de parceiros funcionais de SEPT1, SEPT5 e SEPT7. 2010. Tese (Doutorado em Física - Biomolecular) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.

IC29

Produção heteróloga das fosfodiesterases c-di-GMP específicas da família HD-GYP de *Pseudomonas aeruginosa* e *Xanthomonas axonopodis*

TORRES, Naiara Utimura¹; CHELESKI, Juliana¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹

naiara.utimura@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Recentemente, maior ênfase tem sido dada à noção de que culturas bacterianas existem em comunidades celulares, os biofilmes. Tal estilo de vida pode induzir diversas respostas celulares, levando à formação de organismos mais resistentes comumente encontrados na forma de patógenos oportunistas e infecções hospitalares. (1) O principal mensageiro intracelular da formação de biofilme é o c-di-GMP, nucleotídeo que pode ser degradado por enzimas com o domínio HD-GYP. (2) Por regular essa importante via biossintética, o trabalho visa caracterizar estruturalmente e cataliticamente seis proteínas HD-GYP de *P. aeruginosa* e *X. axonopodis* (PA14_10820, PA14_63210, PA14_30830, XAC_2493, XAC_0350 e XAC_1877), até então não estudadas. Para isso, todos os genes foram amplificados e subclonados no vetor pET-SUMO. As proteínas foram expressas em *Escherichia coli* BL21 (DE3) e testes de expressão foram conduzidos, revelando proteínas superexpressas e solúveis. As purificações em maior escala de PA14_10820, PA14_30830 e XAC_1877 se deram por cromatografia de afinidade, uma vez que esse vetor produz a proteína SUMO 6xHis-tag fusionada à proteína de estudo. Após a primeira purificação, foi feita a clivagem da proteína fusionada com a enzima ULP1 6xHis-tag, seguida de uma nova cromatografia de afinidade e posterior cromatografia de exclusão molecular (SEC). O método de purificação apresentou-se eficiente e as proteínas foram obtidas com elevado grau de pureza. Análise térmica de PA14_30830 revelou uma temperatura de desnaturação de 45,5°C, sendo o processo irreversível. Análises de SEC e DLS (espalhamento dinâmico de luz) mostraram que PA14_10820 encontra-se em uma forma monomérica e PA14_30830 e XAC_1877 em formas diméricas. Buscas de conservação de domínio mostram uma conservada estrutura proteica: um primeiro domínio regulador de resposta REC ou de função desconhecida DUF3391 seguido do domínio HD-GYP. Estudos da vizinhança gênica das proteínas com domínio REC revelam que PA14_36210 não possui proteína quinase ativadora associada a ela. A ausência de tal proteína pode acarretar na não fosforilação do domínio REC, podendo assim comprometer a atividade das HD-GYP *in vivo*. (3) Além disso, por não estarem fosforiladas quando expressas heterologicamente, é possível que as proteínas com domínio REC estejam em uma forma inativa. XAC_0350 e PA14_10820 possuem um domínio de função desconhecida DUF3391 substituindo o domínio REC, sendo assim novos potenciais enzimáticos intrigantes para estudo. Nesse contexto, testes de atividade das três proteínas purificadas estão sendo planejados e já encontram-se em andamento, assim como ensaios cristalográficos. Juntos, tais estudos resultarão em um melhor entendimento das proteínas com domínio HD-GYP e, conseqüentemente, da importante e complexa via de sinalização do biofilme, estabelecendo bases para o desenvolvimento de novos fármacos para tratamento de doenças infecciosas.

Palavras-chave: HD-GYP. c-di-GMP. Fosfodiesterase.

Referências:

- 1 O'TOOLE, G.; KAPLAN, H. B.; KOLTER, R. Biofilm formation as microbial development. **Annual Reviews of Microbiology**, v. 54, n. 1, p. 49-79, 2000.
- 2 HENGGE, R. Principles of c-di-GMP signalling in bacteria. **Nature Review Microbiology**, v. 7, n. 4, p. 263-273, 2009.
- 3 SLATER, H.; MORALES, A. A.; BARBER, C. E.; DANIELS, M. J.; DOW, J. M. A two-component system involving an HD-GYP domain protein links cell-cell signalling to pathogenicity gene expression in *Xanthomonas campestris*. **Molecular Microbiology**, v. 38, n. 5, p. 986-1003, 2000.

Resumos

Workshop de Pós-Graduação

Abstracts - Graduate Research Workshop

PG1

Utilização de laser de femtossegundo na microestruturação de silício amorfo hidrogenado

ALMEIDA, Gustavo Foresto Brito de¹; CARDOSO, Marcos Roberto¹; CONSTANTINO, Carlos José Leopoldo²; AOKI, Pedro Henrique Benites²; RODRIGUES, Carlos Alberto³; LIMA JUNIOR, José Jorge Dantas de³; COSTA, Luciano da Fontoura¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹
gustavo.foresta.almeida@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Ciências e Tecnologias - UNESP

³Departamento de Ciências Exatas - UFRB

A microestruturação a laser de femtossegundos tem se mostrado de grande relevância em diversas áreas de aplicações. (1) Um bom exemplo de tal relevância na tecnologia é a mudança radical evidenciada no silício sobre a irradiação de pulsos de femtossegundos. (2) A habilidade de modificar propriedades optoeletrônica foi sabiamente usada para a melhoria significativa de detectores. Neste trabalho, usamos um laser de 150 fs centrados em 775 nm operando numa taxa de repetição de 1 kHz para induzir modificações na superfície de filmes finos de silício amorfo hidrogenado (a-Si:H). O feixe laser foi focalizado por uma lente de distância focal de 20 cm (cintura do feixe no foco de $20\ \mu\text{m}$) na superfície do material, e varrido sobre a amostra usando um par de espelhos galvanométricos. Procedemos experimentos utilizando diferentes energias de pulso e velocidades de varredura. Após o tratamento a laser, espectroscopia micro-Raman revelaram uma cristalização parcial do a-Si:H. Microscopia de força atômica (AFM) combinada com uma análise computacional da morfologia do material foi usada para interpretar o padrão produzido pelo laser. Nossos resultados indicam que para energias maiores a altura e raio médio e a polidispersividade dos micropicos aumentam, enquanto que o número de picos diminui devido à aglomeração. A forma geométrica desses picos micrométricos mudou de esférico para ovalado. Tais resultados ajudam a ter um melhor entendimento sobre microestruturação a laser de femtossegundos na superfície de a-Si:H e quais os parâmetros próprios para obter um dado padrão na superfície. Os autores agradecem a FAPESP, CNPq e CAPES pelo apoio financeiro e André Romero pelo suporte técnico.

Palavras-chave: Laser de femtossegundo. Microestruturação. Silício amorfo.

Referências:

- 1 TULL, B. R.; CAREY, J. E.; MAZUR, E.; MCDONALD, J. P.; YALISOVE, S. M. Silicon surface morphologies after femtosecond laser irradiation. **MRS Bulletin**, v. 31, n. 8, p. 626-633, Aug. 2006.
- 2 KIM, S.-O.; KHODIN, A.; LEE, J. K. Hydrogenated amorphous/nanocrystalline silicon thin films on porous anodic alumina substrate. **Surface Review and Letters**, v. 17, n. 3, p. 283-288, 2010.

PG2

Instrumentação computacional integrada em tempo real para experimentos com o duto óptico da mosca

ALMEIDA, Lirio Onofre Baptista de¹; SLAETS, Jan Frans Willem¹

lirio@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A análise da estrutura temporal dos trens de spikes, gerados por neurônios sob influência de um estímulo conhecido, é explorada para decifrar a codificação na transmissão de informação, tendo grande contribuição para o entendimento do sistema nervoso. A geração de estímulos visuais de alta velocidade tem sido uma dificuldade enfrentada para P&D em neurociências, principalmente quando se usa insetos com fotorreceptores de resposta rápida, tais como moscas.(1) Este trabalho tem como objetivo desenvolver um equipamento integrado capaz de fornecer e sincronizar estímulos visuais, realizar a aquisição dos dados de sinais neurais extracelulares e viabilizar sua monitoração em tempo real através da visualização de histogramas e taxas de disparo utilizados em experiências in vivo no estudo da visão de invertebrados no Laboratório de Neurobiofísica DipteraLab do IFSC.(2) A integração desta instrumentação eletrônica permitirá a execução de experimentos que, através do monitoramento em tempo real dos dados neurais obtidos, e uma conseqüente pré-avaliação comportamental dessas respostas neurais, poderão fornecer subsídios para alterações do tipo de estímulo aplicados durante os experimentos de maneira inédita.(3)

Palavras-chave: Neurobiofísica. Estímulo visual. Instrumentação computacional.

Referências:

- 1 ALMEIDA, L. O. B.; SLAETS, J. F. W.; KOBERLE, R. VSImG a high frame rate bitmap based display system for neuroscience research. **Neurocomputing**, v. 74, n. 10, p. 1762-1768, 2011.
- 2 FERNANDES, N. M.; PINTO, B. D. L.; ALMEIDA, L. O. B.; SLAETS, J. F. W.; KOBERLE, R. Recording from two neurons: second-order stimulus reconstruction from spike trains and population coding. **Neural Computation**, v. 22, n.10, p. 2537-2557, 2010.
- 3 MILLAR, J. Extracellular single and multiple unit recording with microelectrodes. In: STAMFORD, J.A . (Ed). **Monitoring neuronal activity: a practical approach** . Oxford: Oxford University Press, 1992. p.1-27. ISBN 019963243.

PG3

Medida de observável de correlações quânticas

ALMEIDA-SILVA, Isabela¹; SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico¹; AUCCAISE, Ruben²; OLIVEIRA, Ivan³; SARTHOUR, Roberto³; BONAGAMBA, Tito José¹; GIROLAMI, Davide⁴; ADESSO, Gerardo⁴; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro¹; SOARES-PINTO, Diogo¹
isabela.almeida@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Solos - Rio de Janeiro

³Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF

⁴School of Mathematical Sciences - University of Nottingham

Por muito tempo acreditou-se que o emaranhamento era o único responsável pela maior eficiência observada no processamento quântico da informação. Quando se demonstrou que não era possível produzir emaranhamento em sistemas de RMN, à temperatura ambiente, a técnica foi amplamente criticada. No entanto, foi demonstrado que estados separáveis podem apresentar outros tipos de correlação não-clássica. A caracterização e quantificação de correlações clássicas e quânticas tornaram-se, então, um dos problemas de maior importância no estudo de informação quântica. Com base em conceitos de teoria de informação, Ollivier e Zurek (1) propuseram uma forma de medir correlações quânticas denominada de Discórdia Quântica. Em sistemas de RMN, esta quantificação é feita a partir do operador densidade de desvio. Experimentalmente, isto implica em realizar o dispendioso processo de tomografia do estado quântico, para o qual é necessário adquirir vários espectros, após a aplicação de seqüências de pulsos específicas, e a partir das intensidades dos mesmos se reconstrói a matriz densidade de desvio. Além disso, para sistemas biparticionados, o cálculo da discórdia envolve um processo de extremização sobre o conjunto de projetores de medida de um dos subsistemas, ou seja, é necessário realizar um número razoável de operações matemáticas sobre o operador densidade obtido experimentalmente. Como a determinação da discórdia está envolta nesta dificuldade de encontrar o conjunto de medidas que afeta menos o estado de partida, várias medidas alternativas de discórdia vem sendo propostas. Entre elas, Dakic e colaboradores (2) propuseram uma medida geométrica, conhecida como Discórdia Geométrica. Para um sistema de dois q-bits, Girolami e Adesso (3) propuseram a quantidade $Q(\rho)$, que permite calcular o valor de D_g e é experimentalmente mais acessível, visto que depende diretamente das entradas da matriz densidade do sistema. Com o intuito de validar experimentalmente essa proposta, buscamos, neste trabalho, medir a quantidade $Q(\rho)$ em um sistema de RMN. Para isto, reescrevemos $Q(\rho)$ em termos das funções de correlação de spin e mostramos que através de um conjunto bem definido de seqüências de pulsos de RF é possível calcular as correlações a partir de medidas diretas da magnetização de uma única espécie nuclear (q-bit), não sendo necessário efetuar o processo de tomografia. Os experimentos foram realizados em um espectrômetro VARIAN Infinity Plus 500 MHz, localizado no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, utilizando amostras de clorofórmio enriquecido com ^{13}C ($^{13}\text{CHCl}_3$), correspondendo a um sistema de dois spins ativos (^{13}C e ^1H , sistema de 2 q-bits) e uma sonda Varian 5 mm equipada com bobinas de gradiente. Primeiramente, realizou-se as medidas da magnetização de um único q-bit (núcleo de ^1H). Em seguida, para que fosse possível comparar os resultados obtidos, foi realizada a tomografia do estado. Este procedimento foi efetuado para diversos intervalos de tempo, de

forma a obtermos a evolução temporal da quantidade D_g . Observou-se que os resultados obtidos são idênticos para os dois métodos, demonstrando que o caráter quântico de um sistema de RMN pode ser obtido diretamente através de medidas da magnetização nuclear após a aplicação de seqüências de pulsos específicas, que serão apresentadas e discutidas.

Palavras-chave: Informação quântica. Discórdia quântica. Discórdia geométrica.

Referências:

- 1 OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. **Physical Review Letters**, v. 88, n.1, p. 017901(1-4), 2002.
- 2 DAKIC, B.; VEDRAL, V.; BRUKNER, C. Necessary and sufficient condition for nonzero quantum discord. **Physical Review Letters**, v. 105, n.19, p.190502(1-4), 2010.
- 3 GIROLAMI, D.; ADESSO, G. Observable measure of bipartite quantum correlations. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 15, p. 150403(1-6), 2012.

PG4

Avaliação da capacidade antimetastática de análogos guanidínicos sintéticos: triagem biológica e identificação do alvo molecular

ALTEI, Wanessa Fernanda¹; VALLI, Marília²; SANTOS, Ricardo Nascimento dos¹; REGASINI, Luis Octavio²; BOLZANI, Vanderlan da Silva²; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹
wanaltei@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²NuBBE - Instituto de Química - UNESP

A metástase é a principal causa de mortes em pacientes com câncer. (1) O processo envolve uma série de eventos que vão desde o remodelamento do citoesqueleto celular até a digestão da matriz extracelular e o extravasamento das células para outros locais. Não se trata, portanto, de um alvo singular, mas de um conjunto de alvos potenciais para a atuação de inibidores. Dentre as abordagens adotadas em estudos sobre metástase, a busca por inibidores da migração celular tem passado por uma crescente evolução nos últimos anos. Ensaios *in vitro*, como *wound healing* (2), ensaios de inibição de migração e invasão celular em câmara de Boyden (3) e ensaios frente a alvos moleculares bem estabelecidos são versáteis na identificação e caracterização de estruturas capazes de alterar a mobilidade celular. Este trabalho apresenta resultados obtidos a partir da realização de ensaios de WH de uma série de 10 análogos guanidínicos sintéticos. Os compostos com atividade de inibição de migração identificados nestes ensaios foram também submetidos a ensaios de polimerização de tubulina (um dos alvos mais conhecidos contra o câncer) a fim de identificar o possível alvo molecular responsável pela atividade. A série dos análogos guanidínicos foi avaliada em ensaio de WH na linhagem MDA-MB-231 de câncer de mama. Nesse ensaio, as células foram plaqueadas em placas de 24 poços, e após o crescimento adequado, o meio de cultura foi retirado e, com o auxílio de uma ponteira estéril, uma ferida foi criada na monocamada celular. Os compostos teste foram solubilizados em meio de cultura e adicionados à monocamada com a ferida. A inibição foi avaliada comparando-se a área dessa ferida no tempo 0h e 22h por meio da análise de fotomicrografias. Os ensaios de WH em dose única resultaram em 3 compostos da série capazes de inibir a migração celular em concentrações inferiores a 10 μM . A análise da série completa mostrou que a substituição do nitrogênio do grupo guanidina provoca a perda da atividade. Comparando-se os compostos ativos com os demais análogos da série, cujas cadeias carbônicas são menores, observamos uma redução da atividade com a redução da cadeia. O composto mais ativo foi selecionado para ensaios quantitativos de inibição da migração celular e ensaios de citotoxicidade, que demonstraram valores de IC₅₀ da ordem de 3 μM e 10 μM , respectivamente. A partir desses resultados foram realizados ensaios de polimerização de tubulina na presença dos 3 compostos ativos, a fim de determinar a capacidade desta série em modular a formação de microtúbulos. Resultados preliminares destes ensaios em dose única (250 μM) levaram à observação de atividade de inibição da formação de microtúbulos, indicando a tubulina como um possível alvo responsável pela atividade anticâncer observada em células. Os resultados mostram que os compostos testados possuem atividade de inibição da migração celular de células metastáticas, sendo, portanto, potenciais candidatos a agentes anticâncer. Destaca-se também a associação dos ensaios *in vitro* de WH e de polimerização de tubulina como uma abordagem importante para o planejamento racional de novos agentes

antitumorais.

Palavras-chave: Câncer. Migração celular. Tubulina.

Referências:

1 CHANG, T. T.; MORE, S. V.; LU, I. H.; HSU, J. C.; CHEN, T. J.; JEN, Y. C.; LU, C. K.; LI, W. S. Isomallyngamide A, A-1 and their analogs suppress cancer cell migration in vitro . **European Journal of Medicinal Chemistry**, v. 46, n. 9, p. 3810-3819, 2011.

2 YUE, P. Y. K.; LEUNG, E. P. Y.; MAK, N. K.; WONG, R. N. S. A simplified method for quantifying cell migration/wound healing in 96-well plates. **Journal of Biomolecular Screening**, v. 15, n. 4, p. 427-433, 2010.

3 SHAN, D. D.; CHEN, L.; NJARDARSON, J. T.; GAUL, C.; MA, X.; DANISHEFSKY, S. J.; HUANG, X. Y. Synthetic analogues of migrastatin that inhibit mammary tumor metastasis in mice. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 102, n. 10, p. 3772-3776, 2005.

PG5

Identificação de movimentos literários usando redes complexas

AMANCIO, Diego Raphael¹; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹
diegoraphael@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O uso de métodos estatísticos para analisar grandes bases de texto tem sido útil para revelar padrões de comportamento humano, estabelecendo laços históricos entre culturas e línguas. (1) Neste estudo, identificamos movimentos literários modelando livros publicados no período de 1590 a 1922 como redes complexas (2), cujas medidas topológicas foram estudadas com técnicas de análise multivariada para gerar seis grupos de livros. Estes grupos correspondem a períodos literários em evidência ao longo dos últimos cinco séculos. O fator mais importante contribuindo para distinguir entre diferentes estilos literários foi o comprimento médio dos caminhos mínimos (principalmente a assimetria de sua distribuição). Além disso, foi observada uma tendência de crescimento desta medida, sugerindo um crescimento da complexidade sintática ao longo do tempo. (3) Também foi verificado que as palavras tendem a ser usadas mais uniformemente, pois o coeficiente da lei de Zipf para a distribuição de frequência tende a diminuir. Mudanças nos estilos literários ocorrem geralmente opondo-se ao estilo imediatamente anterior. As abordagens adotadas neste estudo são genéricas e por este motivo podem ser usadas para analisar uma série de características de línguas e culturas.

Palavras-chave: Redes complexas. Estilometria. Reconhecimento de padrões.

Referências:

- 1 MICHEL, J. B. et al . Quantitative analysis of culture using millions of digitized books. **Science**, v. 331, n. 6014, p. 176-182, 2011.
- 2 NEWMAN, M. E. J. **Networks**: an introduction. Oxford: Oxford University Press, 2010. 720 p.
- 3 AMANCIO, D. R.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; COSTA, L. da F. Identification of literary movements using complex networks to represent texts. **New Journal of Physics**, v. 14, n. 043029, 2012. Doi:10.1088/1367-2630/14/4/043029.

PG6

Permissividade elétrica e perda dielétrica de cerâmicas multicamadas de $\text{BaTi}_{(1-x)}\text{Zr}_x\text{O}_3$

AMARAL, Thiago Martins¹; GUALBERTO, Alan Rodrigo Marinho¹; ANTONELLI, Eduardo²; HERNANDES, Antonio Carlos¹
thimaral@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciência e Tecnologia de São José dos Campos - UNIFESP

Este trabalho tem por objetivo obter cerâmicas multicamadas de $\text{BaTi}_{(1-x)}\text{Zr}_x\text{O}_3$ com altos valores de permissividade elétrica e baixa perda dielétrica em um amplo intervalo de temperatura. Foram produzidos pós de $\text{BaTi}_{(1-x)}\text{Zr}_x\text{O}_3$ para $x = 0, 0,05, 0,1, 0,15, 0,2$ e $0,25$ pelo método dos precursores poliméricos e obtidas cerâmicas puras e multicamadas por prensagem uniaxial, seguida de prensagem isostática e sinterização em atmosfera ambiente, sendo que as cerâmicas multicamadas têm suas camadas conformadas em série, uma sobre as outras, durante a prensagem uniaxial. A constante dielétrica das cerâmicas multicamadas pode ser prevista a partir da regra da mistura simples de fases (1) usando as constantes dielétricas dos materiais puros como dados de entrada no modelo e selecionando valores convenientes de frações volumétricas. A permissividade elétrica e a perda dielétrica foram obtidas para frequências 10^n Hz, para n inteiro variando de 0 a 6 e intervalo de temperatura entre 25°C e 150°C com taxa de aquecimento de $1^\circ\text{C}/\text{minuto}$. A densidade relativa final das cerâmicas está acima de 95 % da densidade do BaTiO_3 e a permissividade elétrica e a perda dielétrica das amostras puras estão em concordância com o observado na literatura. (2-3) E as propriedades elétricas das amostras multicamadas estão em acordo com o previsto pelo modelo de mistura simples, sendo um compósito com intervalo de máximo de permissividade de 85°C , enquanto que o das amostras puras é de 15°C em torno da transição ferroelétrico/paraelétrico que apresentam; no entanto, por se escolher a configuração em série, tem-se uma diminuição no valor da permissividade em relação ao das amostras puras. Quanto a perda dielétrica, não houve grande variação entre as diferentes amostras. Como o modelo de mistura simples de fases não leva em consideração a difusão entre os componentes, pode-se concluir que ocorre pouca difusão entre as fases usadas. E também, conclui-se que a cerâmica multicamada possui maior confiabilidade como meio dielétrico em capacitores que trabalham em condições térmicas diversas.

Palavras-chave: Ferroelétricos. BaTiO_3 . Capacitores multicamadas.

Referências:

- 1 NEWNHAM, R. E. Composite electroceramics. **Ferroelectrics**, v. 68, n. 1, p. 1-32, 1986.
- 2 JAFFE, B.; COOK JR., W. R.; JAFFE, H. **Piezoelectric ceramics**. London: Academic Press, 1971.
- 3 YU, Z.; ANG, C.; GUO, R.; BHALLA, A. S. Dielectric properties of $\text{Ba}(\text{Ti}_{1-x}\text{Zr}_x)\text{O}_3$ solid solutions. **Materials Letters**, v. 61, n. 2, p. 326-329, 2007.

PG7

Estudo da alteração da fluorescência da protoporfirina IX para aplicações em diagnóstico

ANDRADE, Cintia Teles de¹; PRATAVIEIRA, Sebastião¹; VOLLET-FILHO, José Dirceu¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹

cintya.teles@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As estimativas de câncer de pele não melanoma, no Brasil, para o ano de 2012 apontam a ocorrência de aproximadamente 134 mil novos casos. (1) Prevenção e detecção são fundamentais na melhoria do prognóstico dessa doença. Por isso é de grande importância encontrar técnicas auxiliares para ajudar em sua detecção. A técnica de fluorescência marcada utilizando ácido aminolevulínico (ALA) é de interesse para tal, pois apresenta seletividade para formação da protoporfirina IX (PpIX) em células alteradas, com emissão de fluorescência característica na região sensibilizada. A PpIX é o fotossensibilizador utilizado também na terapia fotodinâmica — tratamento auxiliar de câncer de pele do tipo não melanoma que consiste na ação conjunta do fotossensibilizador com uma fonte de luz e o oxigênio molecular, resultando em formação de espécies reativas citotóxicas (2) — e o monitoramento de sua farmacocinética e fotodegradação são de interesse para estudos de dosimetria da técnica. O objetivo deste trabalho, portanto, é desenvolver um modelo para monitorar a formação e degradação da PpIX em diferentes profundidades in vitro, e extrapolar esse modelo para observações in vivo. Além disso, pretende-se monitorar a farmacocinética da PpIX com excitação na região do vermelho (630 nm) para obtenção de fluorescência no infravermelho, de modo a ampliar as possibilidades de monitoramento em tempo real (eliminando dificuldades técnicas observadas para outros comprimentos de onda). Para a realização do primeiro objetivo está sendo viabilizado o sistema experimental para investigação em diferentes comprimentos de onda in vitro, que consiste de um phantom de pele contendo 2% de nanquim, 1% de Lipofundin e 5% BRIJ-35 (3). Um centro fluorescente estará mergulhado na solução de phantom a diferentes profundidades da superfície, e será excitado com diferentes comprimentos de onda no intervalo do visível, de modo que se colete a fluorescência induzida por esta excitação. A partir desta coleta, será elaborado o modelo para descrição da eficiência de excitação em função do comprimento de onda e da profundidade, de modo que seja possível identificar a profundidade de uma amostra de acordo com a resposta de fluorescência e a excitação utilizada. Para a segunda etapa, estão sendo feitos testes para encontrar a melhor configuração de filtros ópticos para o sistema de detecção; esta escolha será determinante para avaliação da possibilidade de detecção de fluorescência do fotossensibilizador, pois são os filtros que determinam a possibilidade de separar o sinal de excitação do sinal de fluorescência, o que atualmente é uma limitação da técnica.

Palavras-chave: Fluorescência. Diagnóstico. Terapia fotodinâmica.

Referências:

1 INSTITUTO NACIONAL DO CANCER. INCA. **Estimativa 2012**. Disponível em: <www.inca.gov.br>. Acesso em: 14 ago. 2012. .

- 2 VALENTINE, R. M.; IBBOTSON, S. H.; BROWN, C.T.A.; WOOD, K.; MOSELEY, H. A quantitative comparison of 5-aminolaevulinic acid- and methyl aminolevulinate-induced fluorescence, photobleaching and pain during photodynamic therapy. **Photochemistry and Photobiology**, v. 87, n. 1, p. 242-249, 2011. .
- 3 KEPSHIRE, D.; DAVIS, S. C.; DEHGHANI, H.; PAULSEN, K. D.; POGUE, B. W. Fluorescence tomography characterization for sub-surface imaging with protoporphyrin IX. **Optics Express**, v. 16, n. 12, p. 8581-8593, 2008.

PG8

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

ANDREETA, Mariane Barsi¹; BONAGAMBA, Tito José¹

mariane.andreeta@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O uso de técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) para a caracterização de meios porosos contribui de forma extensiva na caracterização da estrutura destes materiais. (1) As principais técnicas de RMN utilizadas para este estudo são as medidas de parâmetros físicos (como os coeficientes de difusão e tempos de relaxação longitudinal (T1) e transversal (T2)) de fluidos confinados nos poros, os quais têm suas propriedades alteradas pela interação com as paredes do material sólido que o envolve. Através desta interação é possível extrair informações sobre a permeabilidade e tamanho dos poros do material. No entanto, pela heterogeneidade e complexidade desses meios, torna-se um trabalho complexo 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. Por esse motivo, faz-se necessário que as técnicas computacionais de análise destes dados acompanhem este desenvolvimento de novas metodologias, se adaptando às novas aplicações, como, por exemplo, a aplicação de algoritmos da transformada inversa de Laplace (2) para a análise de correlação N-dimensionais dos parâmetros físicos previamente mencionados. Além disso, a simulação computacional da dinâmica macroscópica do fluido confinado é uma ferramenta importante para o entendimento e previsão dos fenômenos físicos estudados. Desta forma, o principal objetivo deste projeto é o desenvolvimento de novas metodologias, equipamentos, e ferramentas computacionais para o estudo de meios porosos, com aplicações importantes na caracterização não somente de rochas, mas também das estruturas de ossos e cerâmicas.

Palavras-chave: Meios porosos. Simulação. Laplace.

Referências:

- 1 DUNN, K. J.; BERGAMN, D. J.; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance:** petrophysical and logging applications. Amsterdam: Pergamon, 2002.
- 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 in Signal Processing**, v. 50, n. 5, p. 1017-1026, 2002.

PG9

Propagação intergaláctica de núcleos com novo modelo de radiação cósmica de fundo em infravermelho

ANJOS, Rita de Cassia dos¹; SOUZA, Vitor de¹

rita@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Dados recentes do Observatório Pierre Auger indicam que uma parcela não insignificante das partículas que atingem a Terra é composta de núcleos de átomos pesados. Desta forma, a interação dos núcleos com a radiação eletromagnética de fundo deve ser modelada para que a partir dos dados medidos na Terra possamos inferir a abundância de elementos e o espectro de energia emitidos na fonte.(1) O processo que trataremos na propagação dos raios cósmicos será o processo de fotodesintegração, que consiste na colisão dos núcleos com os fótons da radiação cósmica de fundo, levando o núcleo a perder um ou mais nucleons em cada colisão. Os núcleos que se desintegram possuem energias em torno de 10^{19} eV, e os fótons comprimento de onda em torno de $\lambda \sim 10 - 100 \mu\text{m}$ (energias de 0.01 - 0.1eV) e estão presentes no RCI (Radiação Cósmica Infravermelha) e RCM (Radiação Cósmica de Microondas). A radiação cósmica de fundo em microondas (RCM) é um tipo de radiação eletromagnética que preenche o Universo. Foi prevista independentemente por Gamow em 1948 e por Alpher e Herman em 1948 e foi observada pela primeira vez por Penzias e Wilson em 1965. A RCM é descrita por um espectro de corpo negro com temperatura de 2.75K. Este espectro consiste de uma densidade de fótons distribuída de acordo com a função de Planck.(2) A radiação cósmica infravermelha (RCI) tem origem extragaláctica e é isotrópica em grandes escalas (3), isso porque a RCI é descrita por um espectro formado a partir de luminosidades e evolução de fontes juntamente com poeira e processos de formação cosmológica de estrelas e galáxias . Incertezas nas medidas de radiação do infravermelho existem devido à contaminação por outras fontes de energia e também por poeira existente juntamente com a radiação detectada. Neste trabalho, propomos um novo modelo da RCI baseada nos dados de vários experimentos e o utilizamos com uma solução analítica para a razão de fotodesintegração, também construída por nós, para a propagação de núcleos no meio intergaláctico e comparamos nossos resultados com trabalhos prévios que abordam outros modelos de RCI e de razão de fotodesintegração.

Palavras-chave: Raios cósmicos. Razão de fotodesintegração. Infravermelho.

Referências:

- 1 PIERRE AUGER COLLABORATION. An upper limit to the photon fraction in cosmic rays above 10^{19} eV from the Pierre Auger Observatory. **Astroparticle Physics** v. 27, p.155-168, 2007.
- 2 HAUSER, M.G.; DWEK, E. The cosmic infrared background: measurements and implications. **Annual Review of Astronomy and Astrophysics** v. 39, p.249-307, 2001. DOI:10.1146/annurev.astro.39.1.249 .
- 3 HAUSER, M. G.; ARENDT, R. G.;KELSSAL, T.; DWEK, E.; ODEGARD, N.; WEILAND, J. L.; FREUDENREICH, H. T.; REACH, W. T.; SILVERBERG, R. F.; MOSELEY, S. H.; PEY, Y. C.; LUBIN, P.; MATHER, J. C.; SHAFER, R. The COBE diffuse infrared background experiment search for the cosmic infrared background. I.limits and detections. **Astrophysical Journal**, v .508, n.1, p. 25-43,1998. .

PG10

Criação e manipulação de estados comprimidos de spin nuclear

ARAUJO-FERREIRA, Arthur Gustavo¹; BONAGAMBA, Tito José¹; AUCCAISE, Ruben²
avatar@if.sc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Solos - Rio de Janeiro

Estados comprimidos de spin foram primeiramente citados por Kitagawa e Ueda. (1) Desde então aplicações desse conceito já foram utilizadas em metrologia quântica e processamento de informação quântica. Nesse tipo de aplicação podem ser usados condensados de Bose-Einstein para criar os estados coerentes e, com a manipulação correta, gerar os estados comprimidos de spin. Também podem ser usados spins nucleares em sistemas de pontos quânticos e, no caso deste trabalho, spins nucleares em sistemas de ressonância magnética nuclear. Estados comprimidos de spin são estados em que a incerteza em uma direção de spin é menor que em uma direção conjugada, respeitando sempre a relação de incerteza de Heisenberg. Em nossos experimentos, o sistema de spins nucleares é descrito de forma análoga a um condensado de Bose-Einstein utilizando a representação de Holstein-Primakov. (2) O núcleo em questão é o núcleo de cério-133 que possui spin $7/2$ e portanto representa um condensado com número de partículas $N=7$. Em nossos experimentos geramos inicialmente os estados coerentes utilizando uma combinação de sequências de pulsos otimizados para o estado específico desejado. A partir desse ponto podem ser realizados experimentos como os de compressão de estados de spin nuclear, proteção de estados comprimidos e experimentos de bifurcação clássica entre dinâmica de Rabi e Josephson e ao final a leitura dos estados finais é feita através do processo de tomografia do estado quântico. (3)

Palavras-chave: RMN. Computação quântica. Estados comprimidos de spin nuclear.

Referências:

- 1 KITAGAWA, M.; UEDA, M. Squeezed spin states. **Physical Review A**, v. 47, n. 6, p. 5138-5143, 1993.
- 2 AUCCAISE, R.; TELES, J.; BONAGAMBA, T.J.; OLIVEIRA, I.S.; AZEVEDO, E.R.; SARTHOUR, R.S. NMR quadrupolar system described as Bose-Einstein-condensate-like system. **Journal of Chemical Physics**, v. 130, n. 14, p. 144501, 2009 .
- 3 ARAUJO FERREIRA, A.G.; BRASIL, C.A.; SOARES-PINTO, D.O.; DE AZEVEDO, E.R.; BONAGAMBA, T.J. Quantum state tomography and quantum logical operations in a three qubits NMR quadrupolar system. **International Journal of Quantum Information**, v. 10, n. 2, p. 1250016, 2012 .

PG11

Estudo da entropia como metodologia para reconhecimento de padrões

ASSIRATI, Lucas¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

assirati@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A entropia é um conceito utilizado em termodinâmica para medir o grau de organização de um meio. Entretanto, este conceito pode ser ampliado para outras áreas do conhecimento, como é o caso da Teoria da Informação. Shannon foi o precursor da Teoria da Informação e propôs o uso da entropia como medida da organização de sinais ou ainda como um método para aferir a quantidade de informação contida num meio. Neste trabalho, pretende-se estudar o potencial da entropia como metodologia para reconhecimento de padrões. Serão considerados a entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon e a sua versão generalizada, proposta por Tsallis. O objetivo do trabalho é realizar uma análise comparativa entre as técnicas de entropia em reconhecimento de padrões e verificar a possibilidade de adicionar melhorias as mesmas. Serão realizados estudos de casos utilizando dados unidimensionais (séries temporais), bidimensionais (imagens binárias) e tridimensionais (imagens cromáticas ou níveis de cinza). Os resultados preliminares mostram que a entropia de Tsallis, através dos múltiplos índices q , tem grande vantagem sobre a entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon (taxa de acerto até três vezes maior). Este resultado é interessante, uma vez que a vasta maioria dos trabalhos que adotam entropia em reconhecimento de padrões são baseados na entropia Boltzmann-Gibbs-Shannon. É apresentado uma análise dos resultados obtidos, mostrando evidências que justificam a vantagem da entropia de Tsallis.

Palavras-chave: Entropia. Reconhecimento de padrões. Teoria da Informação.

Referências:

- 1 BARBIERI, A. L.; ARRUDA, G. F.; RODRIGUES, F. A.; BRUNO, O. M.; COSTA, L. F. An entropy-based approach to automatic image segmentation of satellite images. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, v. 390, n. 3, p. 512-518, 2011.
- 2 FABBRI, R.; GONÇALVES, W. N.; LOPES, F. J. P.; BRUNO O. M. Multi- q pattern analysis: a case study in image classification. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, v. 391, n. 19, p. 4487-4496, 2012.
- 3 SHANNON, C. E.; WEAVER, W. **The mathematical theory of communication**. 9th ed. Illinois: University of Illinois Press, 1962.

PG12

Deformações no modelo de Bullough-Dodd

Deforming the Bullough-Dodd model

AURICHIO, Vinicius Henrique¹; FERREIRA, Luiz Agostinho¹; FOSTER, David¹

vinicius.aurichio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A partir dos anos 1960 uma nova maneira de estudar teorias quânticas de campos se desenvolveu e se popularizou. Passou-se a analisar as equações clássicas para os campos sem nenhum tipo de aproximação, buscando soluções que pudessem descrever modos normais não-lineares (sólitons), e que tivessem a interpretação de novas partículas, diferentes daquelas associadas aos modos normais lineares (ondas planas). Em muitos casos estas partículas têm uma estrutura topológica não trivial que aumenta sua estabilidade frente a colisões. Partículas deste tipo são chamadas sólitons. Um dos modelos que possui sólitons topológicos como solução é o modelo de Bullough-Dodd, que apresenta invariância relativística em duas dimensões. Assim como grande parte dos modelos integráveis suas equações de movimento podem ser escritas como uma condição de curvatura nula para conexões vivendo na álgebra de Kac-Moody afim $A_2^{(2)}$. Estudaremos deformações do modelo de Bullough-Dodd, que podem aumentar seu potencial de aplicabilidade, utilizando as idéias de quasi-integrabilidade propostas recentemente. (1) Essas deformações fazem com que a curvatura não se anule e leva à construção de cargas quasi-conservadas. Nesse trabalho mostramos nossos primeiros resultados no estudo desse sistema, tais como o cálculo das anomalias das cargas e a determinação da transformação de gauge necessária para o estudo do problema.

Palavras-chave: Sólitons. Sistemas integráveis. Bullough-Dodd.

In the 1960s a new approach to quantum field theories developed and became popular. The classical equations of motion were studied without approximations, looking for solutions describing nonlinear normal modes (solitons) that could be interpreted as new particles, different from those associated to linear normal modes (plane waves). In many cases these particles have a nontrivial topological structure, what increases it's stability upon collisions. Such particles are called topological solitons - or just solitons. One such model with solitons as solutions is the Bullough-Dodd. This is model with relativistic invariance in (1+1) dimensions. As most integrable models it's equations of motion can be written as zero curvature condition with connections taking values on the twisted affine Kac-Moody algebra $A_2^{(2)}$. We'll study deformations on the Bullough-Dodd model, what can improve it's applicability potential, using the recently proposed quasi-integrability ideas. (1) With this deformation the curvature don't vanish even when the equations of motion holds, leading to quasi-conserved charges. In the present work we show our first results in studying this system, such as the charge's anomalies and the determination of the gauge transformation needed for the problem study.

Keywords: Solitons. Integrable systems. Bullough-Dodd.

Referências:

1 FERREIRA, L. A.; ZAKRZEWSKI, W. J. The concept of quasi-integrability: a concrete example. **Journal of High Energy Physics**, v. 2011, n. 5, p. 130-1-130-38, 2011.

PG13

Fabricação de micro-ambientes para a investigação de crescimento celular utilizando polimerização via absorção de dois fótons

AVILA, Oriana Ines¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹; FONTANA, Carla Raquel²

oriana@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de análises clínicas, Faculdade de ciências Farmacêuticas de Araraquara - UNESP

Microfabricação a laser, utilizando polimerização via absorção de dois fótons é uma técnica bastante promissora para a fabricação de sistemas de entrega de fármacos, matrizes para engenharia de tecidos e implantes médicos com uma maior variedade de tamanhos, formas e materiais do que os convencionalmente utilizados. Neste trabalho, nos propomos a usar um laser pulsado de femtossegundos para fabricar micro-ambientes, através da fotopolimerização via absorção de dois fótons, os quais serão utilizados para investigar o crescimento da linha de células cancerosas que codifica a proteína verde fluorescente (GFP). A fotopolimerização induzida por absorção de dois fótons será realizada utilizando um oscilador laser de Ti: safira que produz pulsos de 100 fs em 800 nm. As microestruturas produzidas por este método nos permitirão realizar um estudo sistemático do crescimento celular e testes para engenharia de tecidos. Na primeira fase do projeto, nos dedicaremos ao desenvolvimento do sistema de microfabricação, de acordo com as características necessárias para os estudos em células que serão feitos na sequência.

Palavras-chave: Fotopolimerização. Micro-ambientes. Microfabricação.

Referências:

1 OVSIANIKOV, A . Two-photon polymeration technique for microfabrication of CAD-designed 3D scaffolds from commercially available photosensitive materials. **Journal of Tissue Engineering and Regenerative Medicine**, v. 1, n. 6, p. 443-449,2007.

PG14

Estrutura cristalográfica da hemoglobina de *Glossoscolex paulistus*, um complexo de 3,6 milhões de daltons

BACHEGA, José Fernando Ruggiero¹; MALUF, Fernando Vasconcelos¹; HORJALES, Eduardo¹; GARRATT, Richard Charles¹
ferbachega@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Eritrocrorinas são hemoglobinas extracelulares com milhões de daltons de massa molecular, compostas por uma associação de cadeias de globina e que demonstram alta cooperatividade entre suas subunidades. Elas são encontradas no plasma de vários polichetas, oligochetas e alguns molusco. (1) Nas ultimas décadas, essas moléculas despertaram grande interesse científico, devido a seu potencial de uso como sangue artificial. O *Glossoscolex paulistus* é uma anelídeo de vida livre, comumente encontrado no sudeste do Brasil, cuja hemoglobina (HbGp), é uma estrutura hexagonal com massa de 3.6MDa. A unidade biológica (HbGp) apresenta um total de 180 cadeias, 144 cadeias de globinas e 36 cadeias de linkers, associados na forma de doze protômeros. Um protômero é composto por um dodecâmero de globinas e um hétero trímero de linkers (L1, L2 e L3). O dodecâmero por sua vez é composto por 4 tipos de cadeias globina, *a*, *b*, *c* e *d*. Estas 4 cadeias estão primeiramente associadas em um hétero tetrâmero (onde *a*, *b* e *c* são unidas por uma ligação de sulfeto) repetido 3 vezes, formando a estrutura dodecamérica. Até então, apenas a sequencia primária da subunidade *d* de *Glossocolex paulistus* era conhecida. O presente trabalho faz um retrospecto ao longo dos últimos quatro anos, dedicados a sequenciar, cristalizar e resolver a estrutura da HbGp na forma integra. O sequenciamento massivo do transcriptoma do *Glossoscolex paulistus* foi capaz de elucidar as sequencias completas para os sete tipos básicos de cadeias de proteínas que compõem a HbGp, incluindo as isoformas das cadeias *d* e L3. Foram obtidos cristais do complexo inteiro da HbGp na condição: citrato de sódio 1,4M Tris 0.1M pH 8.0, os quais foram posteriormente coletados no Brookhaven National Laboratory, BNL com resolução de 3.2 angstroms. (2) Estrutura da HbGp apresentou grande concordância estrutural com sua homóloga, a estrutura cristalográfica da hemoglobina de *Lumbricus terrestres* (HbLt), PDB2GTL. (3) No entanto, a HbGp apresentou uma série de vantagens em relação ao modelo da HbLt, como por exemplo, mais alta resolução e maior completude, o que permitiu uma análise mais criteriosa dos contatos entre subunidades e conformação de cadeia laterais, assim como, a determinação de novos sítios de metais ligados a a estrutura.

Palavras-chave: Eritrocrorinas. Hemoglobinas. Cristalografia.

Referências:

1 WEBER, R. E.; VINOGRADOV, S. N. Nonvertebrate hemoglobins: functions and molecular adaptations. **Physiological Reviews**, v. 81, n. 2, p. 569-628, 2001.

2 BACHEGA, J. F. R.; BLEICHER, L.; HORJALES, E. R.; SANTIAGO, P. S.; GARRATT, R. C.; TABAK M. Crystallization and preliminary structural analysis of the giant haemoglobin from *Glossoscolex paulistus* at 3.2 angstrom. **Journal of Synchrotron Radiation**, v. 18, n. 1, p. 24-28, 2011.

3 ROYER JR, W. E.; SHARMA, H.; STRAND, K.; KNAPP, J. E.; BHYRAVBHATLA, B. Lumbricus erythrocytorin at 3.5 Å resolution: architecture of a megadalton respiratory complex. **Structure**, v. 14, n. 7, p. 1167-1177, 2006.

PG15

Evidência de uma lei de potências no espectro de energia cinética de uma nuvem atômica turbulenta

BAGNATO, Guilherme de Guzzi¹; TELLES, Gustavo Deczka¹; CARACANHAS, Mônica Andrioli¹; SANTOS, Ednilson¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
gui.bagnato@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No recente experimento, utilizamos campos magnéticos dependentes do tempo para produção de estados turbulentos em um Condensado de Bose-Einstein (BEC) de ^{87}Rb . Observamos uma lei de potência no espectro de energia cinética de uma nuvem turbulenta, análoga à lei de potência "5/3" de Kolmogorov para fluidos clássicos. (1) Nossos resultados são capazes de colocar o BEC como uma alternativa promissora para investigação dos fenômenos turbulentos em superfluidos. O experimento começa com a produção de um BEC em uma armadilha magnética com frequências $\omega_r = 2\pi \times 210$ Hz e $\omega_z = 2\pi \times 23$ Hz, produzido por uma configuração QUIC. Para geração da turbulência quântica são introduzidas no sistema magnético bobinas de excitação que geram um campo oscilatório. Esta excitação gera na nuvem condensada um emaranhamento de vórtices, caracterizando a turbulência quântica. (2) Uma vez produzida a nuvem condensada turbulenta, podemos descobrir a distribuição de momentos, $n(k)$. (3) Esta é diagnosticada por uma imagem de absorção, onde a posição radial de cada átomo depois de um tempo de voo τ é dada por $r = \frac{\hbar k \tau}{m}$. Portanto, a expansão livre gera um perfil de densidade, $n(r) = n(\frac{\hbar k \tau}{m})$, que dá origem a $n(k)$. E por meio deste, encontramos o espectro de energia cinética através da relação $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} n(k)$. A medida experimental é uma projeção bidimensional do perfil de densidade tridimensional, de tal forma que a densidade local da imagem de absorção tem uma contribuição de muitos k s. Com isto, o que medimos de fato é $n'(k')$, que é definido como $n'(k') = \int_{k'}^{\infty} \frac{n(k) dk}{\sqrt{1 - (\frac{k'}{k})^2}}$, com k' sendo a projeção de k no

plano onde a imagem é formada. Finalmente, utilizando argumentos puramente matemáticos e o fato da expansão turbulenta ser isotrópica, recuperamos $n(k)$ através de $n'(k')$ e verificamos uma lei de potências tal que $n(k) \propto k^{-3,03}$ e consequentemente $E(k) \propto k^{-1,03}$.

Palavras-chave: Lei de potência. Turbulência quântica . Condensação de Bose-Einstein.

Referências:

1 KOBAYASHI, M.; TSUBOTA, M. Kolmogorov spectrum of quantum turbulence. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 74, n. 12, p. 3248-3258, 2005. .

2 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; RAMOS, E. R. F.; CARACANHAS, M.; CASTILHO, P.; OLÍMPIO, E. R. F.; 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, p. 043618, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevA.79.043618.

3 NOWAK, B.; SEXTY, D.; GASENZER, T. Superfluid turbulence: nonthermal fixed point in an ultracold bose gas . **Physical Review B**, v. 84, n. 2, p. 020506, 2011. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.020506.

PG16

Nanopartículas $Fe_3O_4@Au$ e aplicações em nanomedicina

BALLESTEROS, Camilo¹; ZUCOLOTTI, Valtencir¹

carturosuarez@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com o desenvolvimento de novos nanomateriais têm-se descoberto propriedades eletrônicas, elétricas, ópticas e catalíticas únicas para aplicações nanotecnológicas. (1) Entre estes nanomateriais com características singulares, estão as nanopartículas (Np) Core@Shell, as quais combinam propriedades físico-químicas de dois materiais diferentes, provendo maior eficiência em aplicações como nanoeletrônica, sensoriamento, biossensoriamento e biomédicas. (2) Neste trabalho, Np Core@Shell são sintetizada com núcleo (Core) de Np Fe_3O_4 e com casca (Shell) de Np Au, formando as Nps $Fe_3O_4@Au$ na presença do dendrímero poli(amidoamina) geração 4.0 (Pamam G4). As propriedades físico-químicas do nanomaterial core-shell são estudadas através de análises espectroscópicas, microscópias e eletroquímicas, além de medidas de magnetização. Essas técnicas revelam a formação das Nps Au nas cavidades do Pamam G4 e as interações eletrostáticas entre os grupos funcionais do Pamam G4 e os grupos OH^- e H^+ da superfície das Nps magnéticas, as quais dão uma forte estabilidade na configuração da Np $Fe_3O_4@Au$. Evidencia-se propriedades óticas da Np Au e propriedades superparamagnéticas da Np Fe_3O_4 , as quais podem ser usadas para aplicações em nanomedicina. As propriedades electrocatalíticas das Nps são utilizadas na detecção de espécies eletroativas de relevância médica. (3) A fabricação dos sensores consiste na deposição de camadas alternadas entre as nanopartículas com o poliânion poli(ácido vinil sulfônico) (PVS) no eletrodo de ITO, levando à configuração de três arquiteturas; $ITO - (Fe_3O_4@Au/PVS)$, $ITO - (Fe_3O_4/PVS)$ e $ITO - (Au/PVS)$.

Palavras-chave: Nanopartículas $Fe_3O_4@Au$. Sensores eletroquímicos. Simulação computacional.

Referências:

- 1 CARUSO, F. Nanoengineering particles of surfaces. **Advanced materials**, v.13, n.1, p.11-22, 2001.
- 2 WANG, L.; PARK, H.; STEPHANIE, I.; LIM, I.; SCHADT, M.; MOTT, D.; LUO, J.; WANG, X.; ZHONG, C. Core@Shell nanomaterials: gold-coated magnetic oxide nanoparticles. **Journal Materials Chemistry**, v.18, p.2629-2635, 2008.
- 3 LUO, J.; WANG, L.; MOTT, D.; NJOKI, P.; LIN, Y.; HE, T.; XU, Z.; WANJANA, B.; LIM, I. Core/shell nanoparticles as electrocatalysts for fuel cell reactions. **Advanced Materials**, v.20, p.4342-4347, 2008.

PG17

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

BARDIVIESSO, Leandro Godoi¹; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini¹; MARTINS, Julia Mara¹; VOLPON, Antonia Garcia Torres²

bardiviezzo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²CENPES-PETROBRAS

Reservatórios de petróleo são ambientes únicos por apresentarem uma combinação de condições ambientais extremas no que se refere à temperatura, pressão e salinidade. Uma grande variedade de espécies de bactérias tem sido isolada deste ambiente (1), dentre as quais destacamos as do gênero *Petrotoga*, que apresentam uma estrutura característica envolvendo a célula, semelhante a uma bainha, chamada toga, e são termofílicas e halofílicas. Em outro projeto realizado por nosso grupo em parceria com a PETROBRAS, amostras de fluidos de poços de produção de petróleo de um reservatório da região Nordeste foram cultivadas e analisadas quanto à presença de bactérias fermentativas e redutoras de sulfato, dentre outros grupos. Espécies do gênero *Petrotoga* foram identificadas por análises moleculares e provavelmente recuperadas nos cultivos em meios enriquecidos, onde se observaram morfotipos com a presença de toga. Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo isolar estes morfotipos por meio de cultivos anaeróbios, e identificá-los molecularmente. Alíquotas dos fluidos foram inicialmente inoculadas em BANHT e Postgate e, a partir da verificação da presença dos morfotipos com toga por microscopia, testaram-se dois meios líquidos para esse isolamento: meio P. mexicana (2) e meio P. olearia. (3) Todos os meios de cultura tiveram a salinidade ajustada para 7% de NaCl e foram incubados a 60°C. Do crescimento obtido nos meios líquidos testados, procedeu-se ao isolamento em meios sólidos. A identificação de um dos isolados (MG02) e das bactérias presentes no cultivo em meio líquido P. olearia foi feita tendo como alvo o gene do DNAr16S. O DNA total obtido dos isolados foi amplificado por PCR utilizando-se o par de primers B27f e U1492r. As reações de sequenciamento foram feitas usando-se os primers universais M13f e M13r e foram aplicadas em um sequenciador automático. As sequências obtidas foram analisadas quanto à qualidade nos programas ChromasPro e BioEdit, e submetidas a um banco de dados utilizando o programa BLAST para uma análise preliminar de identificação do microrganismo mais semelhante. Os clones analisados mostraram identidade de 98% a 100% com *Petrotoga mobilis*, *Petrotoga miotherma*, *Petrotoga halophila* e *Petrotoga olearia*. O projeto prosseguirá com testes de crescimento destas espécies em substratos como xilanas e dextranas, por exemplo, com intuito de melhor analisar possíveis utilidades biotecnológicas.

Palavras-chave: *Petrotoga*. Bactérias termofílicas. Petróleo.

Referências:

1 MAGOT, M.; BERNARD, O.; PATEL, B. K. C. Microbiology of petroleum reservoirs. **Antonie van Leeuwenhoek**, v. 77, n. 2, p. 103-116, 2000.

- 2 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.
- 3 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.

PG18

Estudos espectroscópicos, termodinâmicos e computacionais da interação de dois peptídeos de fusão da glicoproteína Spike do SARS-CoV com modelos de membranas

BASSO, Luís Guilherme Mansor¹; MENDES, Luís Felipe²; FERNANDES, Tácio Vinício Amorim³; PASCUTTI, Pedro Geraldo³; COSTA FILHO, Antonio José da²
guilhermemansor@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

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

³Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho - UFRJ

Acredita-se que a ligação do domínio S1 da glicoproteína spike (S) do coronavírus (CoV) causador da Síndrome Respiratória Aguda Grave (SARS) com receptores celulares causa uma série de rearranjos estruturais na subunidade S2, gerando a energia necessária para impulsionar a fusão entre as membranas celular e viral e, assim, transferir o nucleocapsídeo para o citoplasma da célula do hospedeiro. (1) Dois segmentos hidrofóbicos do domínio S2 da proteína S, chamados de peptídeos de fusão (FP), capazes de modificar as propriedades biofísicas de membranas constituídas por fosfolipídios, são essenciais para a fusão entre as membranas celulares do hospedeiro e viral. Assim, realizamos estudos espectroscópicos, calorimétricos e computacionais para caracterizar a interação destes dois FPs com sistemas-modelo que mimetizam as membranas biológicas. Experimentos de fluorescência e calorimetria diferencial de varredura mostraram que os dois peptídeos se ligam mais fortemente a membranas aniônicas que a zwitteriônicas. Por outro lado, experimentos de Ressonância Paramagnética Eletrônica indicaram que a dinâmica rotacional do peptídeo TOAC-SARS-IFP é modulada tanto pela composição lipídica quanto pelo pH e pela força iônica do meio. Contudo, marcadores de spin em ácidos graxos não reportaram mudança alguma na estrutura dinâmica de micelas zwitteriônicas, enquanto que toda a cadeia acila de surfactantes aniônicos foi perturbada pelos peptídeos. Experimentos de dicroísmo circular (CD), por sua vez, revelaram que as estruturas predominantes para o SARS-FP e para o SARS-IFP na presença de micelas são, respectivamente, fitas- β e α -hélices, em contraste, pois, com a estrutura desordenada apresentada quando em solução tampão. O conteúdo de estrutura secundária dos peptídeos é, outrossim, modulado pelo pH e pela composição lipídica, mostrando, portanto, a grande flexibilidade dos peptídeos em adotar diferentes estruturas dependendo de sua vizinhança. No intuito de adquirir mais informações sobre a estrutura dos peptídeos, usamos o método de *Generalized Simulated Annealing* para gerar um conjunto de conformações a partir de um estado totalmente estendido dos peptídeos e simulações longas de dinâmica molecular para testar a estabilidade da estrutura de menor energia na ausência e na presença de 30% de trifluoroetanol (TFE). Os resultados usando os campos de força Amber99SB-ILDN e Charmm27-CMAP concordaram razoavelmente bem com os dados estruturais obtidos por CD. Por fim, experimentos de Ressonância Eletrônica Dupla do peptídeo TOAC-SARS-IFP-Cys-MTSSL em TFE resultaram em uma distância média de 3,0 nm entre os radicais nitróxidos TOAC-MTSSL, compatível, portanto, com um peptídeo parcialmente enovelado em α -hélice, e uma larga distribuição de distâncias, refletindo a grande flexibilidade da região N-terminal e/ou os diferentes rotâmeros do MTSSL. De modo geral, os resultados indicam que os peptídeos são capazes de se ligar e interagir com modelos de

membranas, podendo, portanto, estar envolvidos em seu mecanismo de fusão. Adicionalmente, interações eletrostáticas e hidrofóbicas desempenham papel importante nas interações peptídeo-membranas, podendo ser relevantes em um processo energeticamente desfavorável como a fusão de membranas. Esses estudos podem ajudar na elucidação dos eventos iniciais envolvidos no processo de fusão e, assim, auxiliar no entendimento mais geral do modo de ação de FPs em nível molecular.

Palavras-chave: SARS. Peptídeos de fusão. Fusão de membranas.

Referências:

1 DIMITROV, D. S. Virus entry: molecular mechanisms and biomedical applications. **Nature Reviews Microbiology**, v. 2, n. 2, p. 109-122, 2004.

PG19

Determinação de parâmetros de massa efetiva em semicondutores III-V a partir de simulações *ab initio*.

BASTOS, Carlos Maciel de Oliveira¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

cmobastos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O cálculo de estruturas de bandas de energia é uma ferramenta fundamental para a investigação e entendimento das propriedades de compostos semicondutores. Formulações de primeiros princípios, ou *ab initio*, com abordagens tais como a implementação da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para resolver as equações de Kohn-Sham, expandindo o conjunto em uma base de ondas planas. (1) Esses métodos funcionam bem para sistemas sem confinamento, o caso *bulk*, mas precisam de muitos átomos para representar as supercélulas de regiões de confinamento (poços, fios e pontos quânticos), aumentando consideravelmente o tempo de simulação. Uma alternativa para o cálculo de sistemas confinados, é utilizando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Neste formalismo, as interações entre as diversas bandas de energia são parametrizadas em uma descrição matricial do Hamiltoniano. Esses parâmetros, entretanto, devem ser obtidos por meio de experimentos ou por *fittings* em estruturas de banda já calculadas. O propósito deste trabalho é utilizar implementações *ab initio* já consagradas na literatura, como Abinit, PAW e Siesta, para obter os parâmetros de modelos matriciais $\vec{k} \cdot \vec{p}$ no ambiente de simulação ASE, *Atomistic Simulation Environment* (2), que acopla diversos módulos de cálculo. O método desenvolvido para o *fitting* utiliza o Hamiltoniano matricial na forma de sua equação secular. Os coeficientes dessa equação são funções dos parâmetros e de pontos do espaço recíproco, podendo ser obtidas numericamente através do sistema linear gerado pelas diversas bandas de energia alvo. Testes preliminares já foram realizados indicando a confiabilidade do procedimento empregado.

Palavras-chave: Semicondutores. *ab initio*. Método kp .

Referências:

- 1 KRESSE, G. ; FURTHMÜLLER, J. . Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set . **Computational Materials Science** , v.6, n. 1, p. 15-50, 1996.
- 2 BAHN, S. R. ; JACOBSEN, K. W. An object-oriented scripting interface to legacy electronic structure code. **Computing in Science & Engineering** , v.4, n.3, p. 56-66, 2002.

PG20

Dinâmica de opinião de Hegselmann-Krause

BATISTA, João Luiz Bunoro¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

bunoro@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Fenômenos coletivos em redes sociais como formação de linguagem ou cultura, crenças, emergência de consenso em relação a algum assunto, aquisição de conhecimento e aprendizagem, dentre outros, tem conduzido a um grande interesse no estudo de comportamentos cooperativos e fenômenos sociais, resultando numa grande variedade de dinâmicas de opinião. Nestes modelos, uma população de agentes interagentes carrega uma variável (ou um conjunto delas) numérica cujo valor representa uma "opinião" (estado) sobre um tópico, com interpretações distintas em cada contexto. Inspirado em conceitos de mecânica estatística e mecanismos sociais, estes estados evoluem governados por regras matemáticas que controlam a dinâmica de interação entre os agentes e a influência de fatores externos. Por outro lado, como o comportamento microscópico real dos elementos é muito rico, o que impossibilita uma descrição simples e com poucos parâmetros, simplificações são tipicamente consideradas e consistem em agentes seguindo uma maioria local ou imitando um vizinho. Assim, partindo de um estado desordenado, o sistema pode se auto-organizar através de um processo de ordenamento levando a um consenso global, ou alternativamente pode alcançar um estado de polarização ou fragmentação. Outro importante ingrediente na modelagem de sistemas reais, é que a representação das interações difere bastante de reticulados ou misturas homogêneas, sendo mais bem descritas por redes complexas, e cujo efeito da estrutura é não trivial. Neste trabalho consideramos a dinâmica de opinião de Hegselmann e Krause. Neste modelo, agentes possuem opiniões que assumem valores contínuos e são atualizadas de acordo com a vizinhança compatível, definida pelo princípio da confiança limitada. Após apresentar uma revisão da literatura, mostramos os resultados da dinâmica para diferentes tipos de topologias, seguida de modificações do modelo que consideram a ação de efeitos externos, como a presença de ruído ou campo. Os resultados obtidos identificam a influência da distribuição de graus, de hubs e da interação em comunidades.

Palavras-chave: Redes complexas. Dinâmicas de opinião. Hegselmann-Krause .

Referências:

1 CASTELLANO, C.; FORTUNATO, S.; LORETO, V. Statistical physics of social dynamics. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 2, p. 591-646, 2009.

2 LORENZ, J. Continuous opinion dynamics under bounded confidence: a survey. **International Journal of Modern Physics C**, v. 18, n. 12, p. 1819-1838, 2007.

PG21

Mobilidade da hélice 12 de receptores nucleares: comparação entre simulações de dinâmica molecular e experimentos de anisotropia de fluorescência

BATISTA, Mariana Raquel Bunoro¹; MARTINEZ, Leandro²

maribunoro@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química - UNICAMP

Receptores nucleares são proteínas responsáveis pela regulação da transcrição de genes e desempenham papel fundamental na regulação do desenvolvimento e metabolismo do organismo. Proteínas dessa superfamília são cadeias polipeptídicas formadas por três grandes domínios: um domínio N terminal, um domínio central denominado domínio de ligação com o DNA (DBD) e um domínio C terminal denominado domínio de ligação com o ligante (LBD). O domínio de ligação com o ligante é formado por um conjunto de α hélices, sendo a hélice 12 fundamental para o mecanismo de ativação da transcrição dependente da ligação com o ligante. Sabe-se que a associação com um ligante influencia a estrutura e a dinâmica do LBD, em especial a dinâmica da hélice 12, favorecendo a ligação com proteínas coativadoras e permitindo assim a ativação da transcrição. Entretanto, a posição "ativa" também é observada em diversas estruturas livres de ligante, o que gera um questionamento sobre o real papel da dinâmica da hélice 12 na regulação da transcrição gênica. (1-2) Embora existam estruturas cristalográficas de receptores livres de ligante com a hélice 12 na posição ativa, estas não fornecem informações sobre a mobilidade da hélice 12, fundamental para a compreensão do mecanismo de ativação dos receptores nucleares. Dessa forma, esse trabalho busca, através de simulações de dinâmica molecular, investigar o papel da dinâmica da hélice 12 na regulação da transcrição gênica. Para obter informações em nível atômico, estão sendo simulados experimentos de anisotropia de fluorescência resolvida no tempo, os quais são comparados com dados experimentais. Nossas simulações descrevem o marcador fluorescente Cysfluor, usado em experimentos de anisotropia de fluorescência, ligado covalentemente à hélice 12 do LBD do receptor holo PPAR γ , em diversas configurações iniciais. Utilizar simulações de dinâmica molecular para comparação com resultados experimentais é interessante uma vez que permite gerar configurações hipotéticas mostrando que tais configurações não concordam com o observado experimentalmente. Para cada sistema simulado foi calculada a variação do momento de dipolo do marcador fluorescente, tal variação está associada ao movimento do marcador e consequentemente da hélice 12. Foi observado que existe uma concordância entre os resultados obtidos através das simulações e o experimental somente para as simulações onde o cysfluor encontra-se em uma configuração "fechada" durante a maior parte da simulação, ou seja, possui uma baixa mobilidade. Esses resultados sugerem que, para o receptor PPAR γ associado a um agonista, a hélice 12 possui uma dinâmica significativamente lenta e possivelmente encontra-se ligado a superfície do LBD, em uma conformação ativa. (2-3)

Palavras-chave: Dinâmica molecular. Receptores nucleares. Anisotropia de fluorescência.

Referências:

- 1 NAFY, L.; SCHWABE, J. W. R. Mechanism of the nuclear receptor molecular switch. **Trends in Biochemical Science**, v. 29, n. 6, p.317-24, June 2004.
- 2 KALLENBERGER, B. C.; LOVE, J. D.; CHATTERJEE, V. K. K.; SCHWABE, J. W. R. A dynamic mechanism of the nuclear receptor activation and its perturbation in a human disease. **Nature Structural Biology**, v. 10, n. 2, p.136-140, Feb. 2003.
- 3 SCHRODER, G. F.; ALEXIEV, U.; GRUBMULLER, H. Simulation of fluorescence anisotropy experiments: probing protein dynamics. **Biophysical Journal**, v. 89, n. 6, p. 3757-3770, Dec. 2005.

PG22

Desenvolvimento de estímulos dinâmicos térmicos para análise do sistema sensorial infravermelho em serpentes

BATISTA, Renata da Fonseca Moraes¹; SLAETS, Jan Frans Willem¹

renata.batista@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente trabalho visa desenvolver um conjunto de estímulos artificiais a serem utilizados no estudo do sistema sensorial infravermelho em serpentes. Pretende-se medir a influência de contraste e movimento, bem como pulsações de temperatura simulando a corrente sanguínea de falsas presas no nervo que conecta os sensores de detecção infravermelho da serpente até o córtex. Todos os animais homeotérmicos (aves e mamíferos) emitem radiação infravermelha na faixa de 10.000nm. (1) As serpentes apresentam duas cavidades entre as narinas e os olhos, a chamada fosseta loreal. Essas aberturas são recobertas por uma membrana inervada, que fazem parte do nervo trigêmeo, cuja terminações nervosas percebem variação de calor. (2,3) Quando a radiação infravermelha de uma presa(predador) atingem a membrana, as inervações ligadas ao cérebro fornecem informações térmicas como tamanho, distância e os movimentos do animal homeotérmico, fazendo com que a serpente se proteja ou ataque sua presa. (3) Especula-se também, que essa imagem se sobrepõe à imagem visual também criada no córtex da serpente. (1) Até o presente, os estudos publicados do efeito de estímulos térmicos em serpentes são apenas baseados em observações comportamentais. Uma experiência preliminar efetuada pelos Profs. Reynaldo D. Pinto (IFSC-USP) e Denis O.V. Andrade (Dept.Zoologia-UNESP) comprovaram que informações térmicas podem ser medidas em vivo captando os sinais elétricos do nervo trigêmeo de cascavéis (*Crotalus durissus terrificus*). As presas artificiais serão construídas em nossos laboratórios dotados de geradores de radiação infravermelha composta por resistências que serão aquecidas na temperatura dos mamíferos (37-41°C) através de controladores de temperaturas. O movimento das falsas presas poderá ser controlado a partir de um equipamento externo. Com esses estímulos criados aliado ao conhecimento comportamental das serpentes à essas questões, espera-se obter medidas quantitativas para uma análise do sistema sensorial e neurológico que permitam elucidar a importância desse sistema nas serpentes.

Palavras-chave: Fosseta loreal. Cascavel. Radiação infravermelha.

Referências:

- 1 CAMPBELL, A. L. et al. Biological infrared imaging and sensing. **Micron**, v. 33, n. 2, p. 211-225, 2002.
- 2 GRACHEVA, E. O. et al. Molecular basis of infrared detection by snakes. **Nature**, v. 464, n. 7291, p. 1006-1011, 2010.
- 3 GORIS, R. et al. Nervous control of blood flow microkinetics in the infrared organs of pit vipers. **Autonomic Neuroscience**, v. 84, n.1-2, p. 98-106, 2000.

PG23

Estudos estruturais do hPPAR α LBD em complexo com ligantes naturais

BERNARDES, Amanda¹; MUNIZ, João Renato Carvalho¹; POLIKARPOV, Igor¹

abernardes@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os PPARs são membros da superfamília de receptores nucleares sendo conhecidos como sensores biológicos do metabolismo lipídico, em particular dos níveis intracelulares de ácidos graxos. Uma característica bastante peculiar é que além de sensores lipídicos também estão envolvidos em outros importantes processos biológicos como o crescimento, o desenvolvimento e a apoptose celular em uma grande variedade de células. (1) As variadas funções dos PPARs são mediadas por três subtipos desse receptor (α , β/δ e γ) expressos em diferentes tecidos e em diferentes períodos do desenvolvimento celular, podendo apresentar ligantes, genes alvos e papéis biológico diferentes. (2) Os ligantes de PPAR podem ser classificados como naturais e sintéticos. Um grande número de moléculas têm sido propostas como ligantes endógenos, que são na maioria ácidos graxos insaturados ou poliinsaturados e eicosanoides. (3) O trabalho realizado até o momento buscou principalmente entender as bases estruturais de interação de ligantes, atrelando estudos estruturais e estudos funcionais. Nesse contexto, muitas tentativas de cristalização foram praticadas e que renderam estruturas cristalográficas do domínio de ligação ao ligante (LBD) do PPAR α complexado com os ligantes endógenos descritos para os PPARs, os ácidos graxos. As estruturas foram refinadas e mostraram claramente densidades eletrônicas dos ligantes no interior do sítio ativo, interagindo diretamente com a hélice doze, que obriga a proteína a adotar a conformação ativa. Adicionalmente, os modelos estruturais desses complexos apresentaram mudanças nas posições ocupadas por esses agonistas no interior do bolsão de ligação da proteína. Esses resultados nos proporcionou um melhor entendimento de como essa importante classe de ligantes naturais podem ativar a proteína e possuir os mesmos efeitos farmacológicos de ligantes sintéticos. Para a confirmação da presença dessas moléculas nos cristais obtidos, experimentos de espectrometria de massas foram utilizados que, além da presença, identificaram também o comprimento da cadeia de carbonos dessas moléculas. As metas supracitadas tem imediato impacto na procura racional de agonistas para esses receptores e se insere dentro de uma perspectiva de promoção do desenvolvimento científico-tecnológico na área de endocrinologia molecular.

Palavras-chave: Receptor nuclear. PPAR. Ácidos graxos.

Referências:

- 1 BURNS, K. A. et al. Modulation of PPAR activity via phosphorylation,. **Biochimica Biophysica Acta**, v. 1771, n. 8, p. 952-60, 2007.
- 2 ESCHER, P.; WAHLI, W. Peroxisome proliferator-activated receptors: insight into multiple cellular functions,. **Mutation Research**, v. 448, n. 2, p. 121-38, 2000.
- 3 SCHULMAN, I. G. Nuclear receptors as drug targets for metabolic disease,. **Advanced Drug Delivery Reviews**, v. 62, n. 13, p. 1307-15, 2010.

PG24

Técnicas de RMN de estado sólido em biomassas submetidas a pré-tratamentos específicos

BERNARDINELLI, Oigres Daniel¹; LIMA, Marisa Aparecida de¹; REZENDE, Camila Alves de¹; POLIKARPOV, Igor¹; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro¹
oigres.daniel@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A caracterização de biomassas de lignoceluloses utilizadas na produção de biomateriais, tais como o etanol, é um desafio devido a estrutura complexa e heterogênea. (1) Portanto, saber a respeito da estrutura química em amostras de biomassas submetidos a pré-tratamentos específicos, para remoção da lignina e hemicelulose, é essencial para entender possíveis modificações na morfologia e composição química. O pré-tratamento é uma etapa básica na produção de etanol de segunda geração utilizando como matéria-prima biomassas de lignoceluloses. (1-2) A técnica de RMN do estado sólido de ¹³C cross polarization-magic angle spinning (CP-MAS) é bastante utilizada para fornece informação sobre a composição química de matéria orgânica. Apesar desta técnica oferecer informações relevantes, outras técnicas avançadas de RMN do estado sólido foram recentemente desenvolvidas e aplicadas, apresentando relevante avanço no entendimento da estrutura das biomassas de lignoceluloses. Neste trabalho, nós investigamos modificações na morfologia e composição química de biomassas de lignocelulose, de bagaço de cana-de-açúcar e casca de eucalipto de duas espécies: *Eucalyptus grandis* (Eg) e híbridos entre *E. grandis* e *E. urophylla* (HGU) submetidas a um tratamento em duas etapas (3), usando ácido diluído com concentração de 1%, seguido por um processo de deslignificação com soluções aquosas de hidróxido de sódio em concentrações 0,25%, 0,5%, 1%, 2%, 4%. O efeito dos pré-tratamentos foi investigado por protocolos específicos de RMN de estado sólido. Este protocolo, antes e depois do pré-tratamento, mostra que hemicelulose e lignina são degradadas, além de indicar a remoção de celulose amorfa da biomassa, o que resulta no aparente aumento da cristalinidade da celulose remanescente na biomassa.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Biomassa de lignocelulose. Pré-tratamento.

Referências:

- 1 WALL, J. D.; HARWOOD, C. S.; DEMAINE, A. L. **Bioenergy**. Washington: ASM Press, 2008. 437 p.
- 2 MIELENZ, J. R. **Biofuels**: methods and protocols. New York: Humana Press, 2009. 293 p.
- 3 REZENDE, C. A.; DE LIMA, M. A.; MAZIERO, P.; DEAZEVEDO, E. R.; GARCIA, W.; POLIKARPOV, I. Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility. **Biotechnology Biofuels**, v. 4, n. 1, p. 1-18, 2011.

PG25

Síntese e caracterização de AgNPs conjugadas com peptídeos antimicrobianos

BERTÉ, Rodrigo¹; LEITE, José Roberto de Souza de Almeida²; ZUCOLOTTTO, Valtencir¹
rodrigo.berte@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal do Piauí - UFPI

A emergência e proliferação de uma ampla variedade de micro-organismos resistentes a diversas classes de antibióticos motiva não somente a busca por inibir esse fenômeno, mas também por novos materiais com propriedades antimicrobianas. (1) A prata há tempos é reconhecida como um material capaz de inibir o crescimento de micro-organismos, sendo por séculos empregada no tratamento de feridas, queimaduras e outras infecções, caindo, porém, em desuso com o advento dos antibióticos hoje empregados. (2) Nesse sentido, visamos avaliar a eventual potencialidade como agente bactericida de nanopartículas de prata conjugadas ao peptídeo antimicrobiano Dermaseptina (DS01), este sendo uma pequena proteína catiônica de 30 aminoácidos, tendo apresentado elevada atividade contra fungos, bactérias e protozoários e baixa toxicidade a células de mamíferos.(3) Demonstraremos resultados que corroboram a conjugação dos constituintes, avaliada por técnicas tais como FTIRS, espectroscopia UV-Vis, CD, dentre outras. Serão também discutidos os primeiros ensaios antimicrobianos realizados com cepas não resistentes de E.Coli e futuras propostas para avaliação da atividade e toxicidade do composto, bem como seu aprimoramento.

Palavras-chave: Prata. Nanopartículas. Dermaseptina.

Referências:

- 1 LEVY, S. B.; MARSHALL, B. Antibacterial resistance worldwide: causes, challenges and responses. **Nature Medicine**, v.10, n. 12, p.S122-S129, 2004.
- 2 RAI, M.; YADAV, A.; GADE, A. Silver nanoparticles as a new generation of antimicrobials. **. Biotechnology Advances**,v. 27, n. 1, p. 76-83, 2009.
- 3 LEITE, J. R. S. A.; BRAND, G. D.; SILVA, L. P.; KÜCKELHAUS, S. A. S.; BENTO, W. R. C.; ARAÚJO, A. L. T.; MARTINS, G. R.; LAZZARI, A. M.; BLOCH JR, C. Dermaseptins from *Phyllomedusa oreades* and *Phyllomedusa distincta*: secondary structure, antimicrobial activity, and mammalian cell toxicity. **Comparative Biochemistry and Physiology: Part A**, v. 151, n. 3, p. 336-343, 2008.

PG26

Correlação entre propriedades varistoras e microestruturais em eletrocerâmicas de $\text{Ba}_{1-x}\text{Er}_x\text{TiO}_3$

BONACIN, Rafael¹; BERNARDI, Maria Inês Basso¹; M'PEKO, Jean Claude¹
rafaelbonacin@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Eletrocerâmicas semicondutoras, com coeficiente de resistividade positiva em função da temperatura são amplamente utilizadas em dispositivos eletrônicos operantes sob condições de tensão e temperatura variáveis. (1) Apesar da vasta gama de aplicações possíveis, o entendimento dos mecanismos envolvidos na interação entre os aspectos microestruturais e as propriedades dielétricas inerentes a esses materiais, quando na presença de um campo elétrico DC, ainda é controverso. (2) Este trabalho tem por objetivo caracterizar o comportamento varistor de eletrocerâmicas de $\text{Ba}_{1-x}\text{Er}_x\text{TiO}_3$ ($x=0,001-0,050$) em função de suas características microestruturais. Os materiais foram sintetizados através do método dos precursores poliméricos (3), com uma calcinação a $700^\circ\text{C}/2\text{h}$, compactação isostática a 300 MPa e sinterização a $1350^\circ\text{C}/3\text{h}$. A correlação entre os aspectos morfológicos com as propriedades varistoras e dielétricas das amostras, em função da concentração de Er^{3+} , é realizada utilizando-se a microscopia eletrônica de varredura (MEV) combinada com a espectroscopia de impedância. Os ensaios elétricos realizados mostram que a resistência elétrica, relativa aos contornos de grão do material, pode ser suprimida cerca de 3 ordens de magnitude proporcionalmente em função da intensidade de um campo DC. Tais resultados indicam características não ôhmicas associadas com as regiões intergranulares deste material.

Palavras-chave: BaTiO_3 . Érbio. Varistor.

Referências:

- 1 MOULSON, A.J.; HERBERT, J.M. **Electroceramics**. 2nd ed. West Sussex: John Wiley and Sons Ltd, 2010 .
- 2 BELTRAN, H.; PRADES, M.; MASÓ, N.; CORDONCILLO, E.; WEST, A. R. Enhanced conductivity and nonlinear voltage-current characteristics of nonstoichiometric BaTiO_3 ceramics. **Journal of the American Ceramic Society**, v. 94, n. 9, p. 2951-2962, 2011 .
- 3 UNITED STATES PATENT OFFICE (Alexandria - US-VA). Maggio P. Pechini. **Method of preparing lead and alkaline earth titanates and niobates and Coating method using the same to form a capacitor**. USPO 3330697, 11 July 1967.

PG27

Correlação entre propriedades espectroscópicas e a estrutura do complexo de $\text{Eu(III):[tBu-COO]}_3\text{Eu}$

BOTELHO, Moema de Barros e Silva¹; GALVEZ-LOPEZ, Maria Dolores²; ALBUQUERQUE, Rodrigo Queiroz³; CAMARGO, Andrea Simone Stucchi de¹
moemabotelho@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade de Muenster - Alemanha

³Instituto de Química de São Carlos - USP

Complexos de európio são interessantes por apresentar emissão em uma faixa de frequência estreita e com alto rendimento quântico. Essas propriedades são bastante exploradas tanto na produção de marcadores biológicos quanto em aplicações ópticas. Para que o complexo apresente alto rendimento quântico é necessária a ausência de grupos supressores da luminescência, tais como moléculas de água, na primeira esfera de coordenação do íon Eu(III) , por isso é interessante a obtenção de complexos com alto número de coordenação. Recentemente foi sintetizado em nosso grupo de pesquisa um complexo de Eu(III) (tBu-COO)₃Eu, com alto rendimento quântico (85%), entretanto não foi possível a obtenção de sua estrutura cristalográfica. Para investigar a estrutura do complexo formado, um estudo da previsão dos níveis Stark através da teoria do campo ligante, utilizando o modelo simples de recobrimento, foi realizado. Os resultados teóricos foram comparados à PL do complexo em solução a baixa temperatura (77K) e juntamente com outras técnicas espectroscópicas (FTIR, absorção UV-Vis) foram utilizados na determinação da estrutura do $\text{[tBu-COO]}_3\text{Eu}$.

Palavras-chave: Európio. Luminescência. Teoria do campo ligante.

Referências:

1 ALBUQUERQUE, R. Q. et al. On the charge factors of the simple overlap model for the ligand field in lanthanide coordination compounds. **Chemical Physics Letters**, v. 331, n. 5-6, p. 519-525, 2000.

PG28

Desenvolvimento de MOUSE de RMN para aplicação em ciência do petróleo e dos materiais

BRAZ, Daniel Cesar¹; D'EURYDICE, Marcel Nogueira¹; SILVA, Rodrigo de Oliveira¹; AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de¹; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; BONAGAMBA, Tito José¹
dcbraz@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Desde a sua descoberta em 1945, a ressonância magnética nuclear (RMN) vem se desenvolvendo com um campo de pesquisa inesgotável, e fornecendo informações ao nível molecular em diversas áreas como a física, química, biologia e medicina. Impulsionada pelo fato de que a sensibilidade e resolução espectral aumentam com a intensidade e homogeneidade do campo magnético, ímãs cada vez mais intensos foram construídos ao longo dos anos, chegando a campos da ordem de 20 T. Hoje, os ímãs são dispositivos pesados e estáticos instalados em laboratórios, preparados especialmente para proteger contra interferências eletromagnéticas e reduzir distorções do campo magnético, a fim de proporcionar as melhores condições experimentais possíveis. Além disso, as amostras de interesse devem ter medidas que permitam ser introduzidas no espaço limitado disponível no orifício interno desses ímãs, definidos por sondas de RMN. Estas questões são certamente uma limitação quando se pretende realizar experimentos de RMN *in situ* (e.g. formações rochosas, poços de petróleo, lençol freático, ossos, etc) ou em amostras arbitrariamente grandes. Em função disso, sistemas abertos de RMN vem sendo desenvolvidos e sendo cada vez mais aplicados. Nesses, ao invés de colocar necessariamente a amostra no interior do ímã, o aparelho pode ser colocado no interior ou superficialmente próximo do objeto a ser analisado, produzindo campos magnéticos intensos e dispersos e de RF que penetram a amostra em estudo. É o caso, por exemplo, do MOUSE de RMN. O Mobile Universal Surface Explorer (MOUSE) de RMN possui um pequeno sensor de RMN portátil, composto por um pequeno magneto unilateral, que gera um campo magnético estático bastante não homogêneo e de intensidade tipicamente variando de 0,1 até 0,5 T, e uma bobina de rf superficial, permitindo o estudo da superfície de materiais. Pelo forte interesse do grupo de pesquisa pertencente ao Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução (LEAR) em realizar experimentos que necessitam de sistemas abertos e portáteis de RMN, está sendo desenvolvido um MOUSE de RMN. Neste trabalho, é apresentado sua configuração e os primeiros resultados obtidos, os quais mostram os desafios científicos e tecnológicos a serem enfrentados para desenvolver sistemas como esse para o estudo de meios porosos, com destaque para rochas petrolíferas e ossos.

Palavras-chave: RMN. MOUSE. Portátil.

Referências:

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

PG29

Avaliação da terapia fotodinâmica em um modelo tumoral tridimensional

BUZZA, Hilde Harb¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹

hilde.buzza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica (TFD) é um tratamento local de neoplasias e outras doenças que vem tendo grandes avanços ao longo dos anos e consiste na interação entre luz e uma substância fotossensibilizadora, levando à transformação do oxigênio molecular em oxigênio singleto, altamente reativo e tóxico para a célula. (1) O uso do modelo de Membrana Corioalantóica (CAM) em ovos de galinha permite o estudo dos efeitos vasculares envolvidos nessa terapia. O desenvolvimento de um tumor nesse ambiente previamente vascularizado visa à obtenção de um modelo de tumor e vasos sanguíneos para o estudo de diversas modalidades terapêuticas, como a terapia fotodinâmica. (2) Para que o crescimento do tumor aconteça na membrana é preciso inserir um pedaço de tecido sobre o modelo de CAM. Há a exploração de diversos protocolos para viabilizar esse modelo tumoral. As estratégias que vem sendo utilizadas são o uso de biópsia de tumor de Erlich em camundongos swiss e o desenvolvimento de núcleos da cultura de célula com nanopartículas em células mamárias. Nesse segundo, há a incorporação das nanopartículas pela célula e a aplicação de uma força magnética (como um ímã) que permite a formação de um núcleo de crescimento tumoral. (3) A análise dos resultados será feita de forma qualitativa com a obtenção de imagens pós-terapia e posterior processamento para quantificar a redução de vasos sanguíneos. Atrelado a isso, será feita análise histopatológica e observação no microscópio confocal da membrana corioalantóica para observação da redução dos tumores. Isso permitirá a verificação da viabilidade celular pós-terapia tanto das células tumorais quanto das células epiteliais dos vasos envolvidos, mostrando a eficiência da TFD.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Membrana corioalantóica. Tumor tridimensional.

Referências:

- 1 WILSON, B. C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. 61-109, 2008.
- 2 STEINER, R. Angiostatic activity of anticancer agents in the chick embryo chorioallantoic membrane assay. **EXS**, v. 61, p. 449-454, 1992.
- 3 SOUZA, G. R. et al. Three-dimensional tissue culture based on magnetic cell levitation. **Nature Nanotechnology**, v. 5, p. 291-296, 2010. DOI:10.1038/nnano.2010.23.

PG30

Colisões envolvendo estados de Rydberg $nD+nD$ numa armadilha de dipolo

CABRAL, Jader de Souza¹; KONDO, Jorge Douglas Massayuki¹; GONÇALVES, Luis Felipe¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹
jscabral@ifsc.ursa.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nós havíamos estudado a interação multi-níveis de dois corpos envolvendo átomos de Rydberg em uma armadilha magneto-óptica e nossos resultados haviam mostrado que o campo elétrico exerce um papel fundamental na dinâmica de interação. (1-2) Neste trabalho, nosso objetivo é estudar a interação $nD + nD$ em uma amostra fria de alta densidade em uma armadilha de dipolo. Portanto, nós carregamos uma armadilha do tipo QUEST de Rb usando um laser de CO_2 de alta potência. O feixe laser de dipolo foi focalizado com uma cintura ($1/e^2$) próxima de $70\mu m$. Para $75W$ de potência, a profundidade da armadilha é $\approx 730\mu K$ e a densidade da amostra é aproximadamente 4×10^{11} átomos/cm³. Os estados nD de Rydberg são excitados por um processo de dois fótons, o primeiro em $780nm$ e o segundo no azul, em $480nm$, ambos os lasers possuem largura de linha de $1MHz$. Durante a apresentação nós iremos mostrar nossos primeiros resultados da interação $nD + nD$ em uma armadilha de dipolo de CO_2 .

Palavras-chave: Rydberg. $nD+nD$. Armadilha de dipolo.

Referências:

1 CABRAL, J. S. et al. Effects of electric fields on ultracold Rydberg atom interactions. **Journal of Physics B: atomic and molecular optical physics**, v. 44, n. 184007, 2011. DOI:10.1088/0953-4075/44/18/184007.

2 CABRAL, J. S. et al. Manipulation of quantum state transfer in cold Rydberg atom collisions. **New Journal of Physics**, v. 12, n. 09302, 2010. DOI:10.1088/1367-2630/12/9/093023.

PG31

Propriedades ópticas da fase β do polímero PFO

CAFACE, Raphael Antonio¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹

raphael@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Polímeros orgânicos, em especial os polifluorenos, possuem uma grande aplicabilidade em dispositivos eletrônicos emissores de luz (OLED). Estudos em derivado de polifluorenos apresentaram uma propriedade interessante na organização de sua estrutura conhecido como fase β que são cadeias poliméricas altamente ordenadas.(1-3) A proposta desse trabalho é estudar as propriedades fotoluminescente da fase beta de filmes finos de PFO (Poly(9,9-diocylfluorene)). Para isso utilizamos soluções 0,3 g/L, 0,6 g/L, 1,25 g/L, 5 g/L em clorofórmio sobre substratos de quartzo e com a técnica de *spin-coating* obtivemos os filmes finos de PFO. Dois métodos foram estudados, o primeiro foi utilizado um criostato de hélio para análise em baixas temperaturas (próximo a 5K) (3), e o segundo utilizamos vapor de tolueno para forçar a formação da fase β no decorrer do tempo (temperatura ambiente). (2) Os filmes mostraram, para os dois experimentos, a formação do pico da fase beta em torno de 470 nm e no aumento da intensidade desse pico para temperatura baixas e na longa exposição ao tolueno.

Palavras-chave: Eletroluminescência . Polímero conjugado. Fase beta.

Referências:

- 1 ENDO, T.; KOBAYASHI, T.; NAGASE, T.; NAITO, H. Anisotropic optical properties of aligned beta-phase polyfluorene thin films. **Thin Solid Films**, v. 517, n. 4, p.1324-1326, 2008.
- 2 GRELL, M.; BRADLEY, D. D. C.; UNGAR, G.; HILL, J.; WHITEHEAD, K. S. Interplay of physical structure and photophysics for a liquid crystalline polyfluorene. **Macromolecules**, v. 32, n.18, p. 5810-5817,1999.
- 3 ARIU, M.; SIMS, M.; RAHN, M. D.; HILL, J.; FOX, A. M.; LIDZEY, D. G.; ODA, M.; CABANILLAS-GONZALEZ, J.; BRADLEY, D. D. C. Exciton migration in beta-phase poly(9,9-diocylfluorene). **Physical Review B**, v. 67, n.19, p.195333-1-195333-11, 2003.

PG32

Simulação de uma estrutura core-shell de AlAs/GaAs

CAMPOS, Tiago de¹; FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

tiagocampo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade, tais como fios e pontos quânticos, são objetos de diversos estudos recentes devido às suas propriedades ópticas e eletrônicas singulares. Suas aplicações são diversas, se estendendo desde áreas biológicas (1) até a computação quântica. Os fenômenos físicos fundamentais nessas nanoestruturas dependem explicitamente da disposição energética dos portadores, ou seja, sua estrutura de bandas. No entanto, a simulação desses sistemas, tanto por métodos *ab initio* quanto por métodos efetivos, tem alto custo computacional. Pelo método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, por exemplo, a simulação envolve a diagonalização de matrizes cujos tamanhos geralmente ultrapassam dezenas de milhares de elementos. Neste trabalho realizaremos o estudo de um sistema físico confinado em duas dimensões, uma nanoestrutura do tipo *core-shell* AlAs/GaAs na fase cristalina *zincblend*. Este estudo se baseia no método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, no formalismo da função envelope e na expansão em ondas planas (2) para a construção matricial do Hamiltoniano. As auto energias são obtidas através da função de diagonalização CHEEVX (da biblioteca LAPACK) e comparadas com o método de minimização iterativo LOBPCG implementado tanto na CPU quanto na GPU. Dominando as técnicas envolvidas na formulação teórica e implementação do programa, o ganho de desempenho na diagonalização permitirá o estudo de sistemas com diversas regiões de confinamento. Um exemplo recente de sistema deste tipo são os grafenos artificiais (3) construídos a partir de pontos quânticos dispostos nos vértices de um hexágono.

Palavras-chave: Core shell. Computação heterogênea . Método k.p.

Referências:

- 1 ROBINSON, J. T.; JORGOLLI, M.; SHALEK, A. K.; YOON, M. H.; GERTNER, R. S.; PARK, H. Vertical nanowire electrode arrays as a scalable platform for intracellular interfacing to neuronal circuits. **Nature Nanotechnology**, v. 7, n. 3, p. 180-184, 2012.
- 2 FARIA JUNIOR, P. E. **Nanowhiskers politípicos:** uma abordagem teórica baseada em teoria de grupos e no método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. 2012. 138 f. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.
- 3 RÄSÄNEN, E.; ROZZI, C. A.; PITTALIS, S.; VIGNALE, G. Electron-electron interactions in artificial graphene. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 24, p. 246803-1-246803-4, 2012.

PG33

Estados de borda em sistemas com múltiplos domínios de massa

CANDIDO, Denis Ricardo¹; EGUES, José Carlos¹

denisricardocandido@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A denominada fase isolante topológica foi experimentalmente descoberta em poços quânticos (QWS) de HgTe. A física de baixas energias dos isolantes topológicos (TIs) bidimensionais é descrita pelo modelo Bernevig-Hughes-Zhang modelo (BHZ) (1), em que a realização de uma fase topológica e uma fase normal depende da massa de Dirac ser negativa ou positiva, respectivamente. Neste trabalho, nós resolvemos o modelo BHZ para uma região de domínio de massa, analisando os efeitos sobre os estados de borda de uma massa de Dirac finita na região do isolante usual (condição de contorno soft-wall). Nós mostramos que na interface entre um TI e um isolante normal (NI), o ponto de Dirac dos estados de borda que aparecem na interface depende fortemente da razão entre as massas de Dirac de ambas as regiões. Também consideramos o caso de múltiplas interfaces como o NI/TI/NI, TI/NI/TI e NI/TI/NI/TI. A realização de tais domínios de massa poderia ser projetada em poços duplos de HgTe ou em sistemas de InAs/GaSb, enquanto eles podem acidentalmente se formar em poços simples de HgTe devido a flutuações no tamanho da amostra.

Palavras-chave: Isolantes topológicos. Estados de borda. Cone de Dirac.

Referências:

1 BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. **Science**, v. 314, n. 5806, p. 1757-1761, 2006. DOI: 10.1126/science.1133734.

PG34

Expansão anômala e condensados mistos

CARACANHAS, Mônica Andrioli¹; SMAIRA, André de Freitas¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
caracanhas@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A primeira etapa do trabalho esteve atrelada aos resultados experimentais do grupo, onde visamos explicar a física por trás da expansão característica apresentada por uma nuvem turbulenta. Tivemos como base um modelo de equações hidrodinâmica, as quais descrevem a dinâmica da expansão de um superfluido. Adotando esse formalismo, porém com um termo rotacional devido à presença dos vórtex, fomos capazes de prever a não inversão do aspecto ratio da nuvem. (1) Esse modelo se baseou na teoria já existente, que lidava com o comportamento de um condensado contendo uma rede de vórtices alinhados. Numa segunda etapa, rederivamos as equações hidrodinâmica por primeiros princípios, considerando o termo referente ao emaranhado de vórtices, clássico indicador da turbulência, já na construção da lagrangiana do sistema. Essa foi uma importante realização não só por reproduzir novamente os valores experimentais assintóticos do aspecto ratio da nuvem turbulenta, mas como também de permitir a que derivássemos as frequências dos modos coletivos, com a linearização dessas equações hidrodinâmica generalizadas. Atualmente estamos desenvolvendo todo um arcabouço teórico que antecede a realização experimental de um condensado misto em nosso laboratório. Portanto trata-se de uma etapa delineadora dos aspectos desse sistema que seriam relevantes para futura reprodução experimental. Em particular, nesse trabalho lidamos com uma situação limite de grande desbalanço entre o número de átomos das duas espécies condensadas. Desta forma pudemos determinar solução analítica para o sistema de equações não lineares acopladas, que por sua vez proporcionaram toda uma série de previsões envolvendo as características termodinâmicas, estabilidade, transição de fase e aplicações experimentais do sistema de condensados mistos.

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

Referências:

1 CARACANHAS, M.; FETTER, A. L.; MUNIZ, S. R.; MAGALHÃES, K. M. F.; ROATI, G.; BAGNATO, G.; BAGNATO, V. S. Self-similar expansion of the density profile in a turbulent Bose-Einstein condensate. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 166, n. 1-2, p. 49-58, 2012.

PG35

Mapeamento global de interações proteicas nas vias de sinalização mediadas por c-di-GMP de *Pseudomonas aeruginosa* e *Xanthomonas axonopodis*

CARDOSO, Andrea Rodrigues¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹

andrea.cardoso@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Induzida por estímulos ambientais, a transição das bactérias do estado planctônico ao estado sésil, em que são formados os biofilmes, é mediada por um sistema de controle dentro da célula bacteriana que ainda não está bem esclarecido. Sabe-se hoje que a alternância entre esses fenótipos está intimamente relacionada com os níveis intracelulares de uma pequena molécula sinalizadora (c-di-GMP), os quais, quando altos, geralmente estimulam a formação do biofilme. (1) Nesse estado, predominante no caso de infecções crônicas, a resistência bacteriana a antibióticos é elevada, o que é um entrave aos tratamentos. Os níveis intracelulares de c-di-GMP são controlados por reações antagônicas envolvendo as diguanilato ciclases da família GGDEF (síntese) e as fosfodiesterases das famílias EAL e HD-GYP (degradação). (1) Uma vez presente, o sinalizador c-di-GMP interage com moléculas efetoras, que, quando ativadas, alteram o fenótipo celular por meio de diferentes mecanismos. (1) Diversos receptores de c-di-GMP já foram identificados, destacando-se as proteínas que contêm o domínio PilZ e as proteínas com os domínios EAL ou GGDEF degenerados. Recentemente, estudos pioneiros têm demonstrado que a interação proteica direta entre membros das vias de sinalização por c-di-GMP desempenha um importante papel na regulação das mesmas. Outro estudo publicado recentemente mostra que, em *Vibrio cholerae*, o sistema de sinalização por c-di-GMP é altamente específico, ou seja, a ação individual de cada enzima na célula está associada a uma única resposta fenotípica e não ao fenótipo como um todo. (2) Novamente, a possível existência de um sistema de interações proteicas nas vias de sinalização foi apontada como uma das hipóteses para explicar o mecanismo molecular que leva ao isolamento de um sinal e sua resposta associada. (2) Estas e outras evidências que têm emergido dão suporte ao estudo aqui apresentado. A proposta deste projeto é uma investigação global da rede de interações de proteínas contendo os domínios GGDEF, EAL, HD-GYP e PilZ em dois organismos, *Pseudomonas aeruginosa* e *Xanthomonas axonopodis* pv. *citri*. Utilizando o método de duplo híbrido bacteriano, que permite a detecção de interações proteicas por meio da ativação de um gene repórter (3), é feito o mapeamento das interações entre todas as proteínas das vias de sinalização (quarenta e nove em *P. aeruginosa* e trinta e nove em *X. axonopodis* pv. *citri*). As interações identificadas poderão ser adicionalmente estudadas por meio de métodos biofísicos. Espera-se que estas análises permitam uma maior compreensão dos mecanismos moleculares envolvidos na sinalização por c-di-GMP, assim como das moléculas envolvidas neste processo.

Palavras-chave: c-di-GMP. Interação proteica. Biofilmes bacterianos.

Referências:

1 HENGGE, R. Principles of c-di-GMP signalling in bacteria. **Nature Reviews Microbiology**, v. 7, n. 4, p. 263-273, 2009.

2 MASSIE, J. P. et al. Quantification of high-specificity cyclic diguanylate signalling. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 109, n. 31, p. 12746-12751, 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.

PG36

Características locais no tráfego de pacotes em redes complexas próximo ao ponto de congestionamento

CARUSO, Jeremihas Sulzbacher¹; TRAVIESO, Gonzalo¹

jeremihas.caruso@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Por muitos anos, a ciência tratou todas as redes complexas como se seus relacionamentos fossem estabelecidos de forma randômica, ou seja, a maioria dos nós teriam aproximadamente o mesmo número de relacionamentos. Porém, o mapeamento da web revelou que, em uma variedade de sistemas complexos, a maioria dos nós tinha poucos relacionamentos, enquanto alguns nós têm uma grande quantidade de conexões. Processos microscópicos dinâmicos e estatísticos são duas facetas de sistemas complexos, que estão intimamente ligadas, e a compreensão da sua interdependência é importante tanto para a previsão quanto planejamento estratégico. Os exemplos mais proeminentes incluem o ruído do tráfego em redes de comunicação, sinais ruidosos em sistemas desordenados e auto-organizado, e as séries temporais das flutuações dos preços nos mercados financeiros. Neste trabalho foi analisado não apenas características globais do tráfego, como a presença ou não de congestionamento na rede como um todo, mas uma análise sistemática das características locais (isto é, de roteadores específicos) do tráfego no ponto de transição entre a fase livre e a fase de congestionamento.

Palavras-chave: Redes complexas. Congestionamento. Transiente.

Referências:

- 1 TADIC, B.; THURNER, S.; RODGERS, G. J. Traffic on complex networks: towards understanding global statistical properties from microscopic density fluctuations. **Physical Review E**, v. 69, n. 3, p. 036102, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevE.69.036102.
- 2 DUCH, J.; ARENAS, A. Scaling of fluctuations in traffic on complex networks. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 21, p. 218702, 2006. DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.218702.
- 3 TANG, X.; WONG, E. W. M.; WU, Z. Integrating network structure and dynamic information for better routing strategy on scale-free networks. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, v. 388, n. 12, p. 2547-2554, 2009.

PG37

Estados quasi-estacionários e invariância conforme

CARVAJAL JARA, Diego Alejandro¹; ALCARAZ, Francisco Castilho¹

dacj1984@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Modelos estocásticos formam um excelente laboratório para se estudar a física dos sistemas interagentes fora do equilíbrio. A intensão neste projeto inicial é o estudo da física de não equilíbrio nestes sistemas. Um dos modelos estocásticos interagentes mais interessantes, é o modelo Raise and Peel (Cresce e descasca)(RPM). (1) A importância deste modelo se deve à íntima conexão do mesmo com modelos estatísticos do equilíbrio (modelo de 6 vértices ou cadeia XXZ) e com o problema matemático de enumeração de matrizes de sinais alternados. Tal conexão implica na invariância conforme do modelo, isto é, as funções de correlação espaciais e temporais são relacionadas. Tal invariância conforme é bastante rara em modelos envolvendo a física de não equilíbrio. Recentemente (2) foi introduzido o modelo Peak Adjusted Raise and Peel Model (PARPM), que é uma generalização do modelo de Raise and Peel com um parâmetro adicional p . Tal parâmetro controla as taxas de transição de forma a dar preferência ou não às configurações com número elevado de picos. A surpresa foi o que o PARPM é invariante conforme para valores de p no regime $0 \leq p \leq p_c$, sendo $p_c \simeq 2$. 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, $U = U_a/U_b = 1$. Inicialmente estudaremos 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) . Questões sobre a extensão da fase com invariância conforme são relevantes e atuais. Percebeu-se também em (3) a existência de um estado absorvente no PARPM para o ponto $p = p_c$. Verificou-se que apesar deste estado para sistemas de tamanho $L \sim 100$ o sistema só vai para o estado absorvente para tempos exponencialmente longos (e^{aL}). Isto implica na existência de estados quasi-estacionários. O estudo em (3) mostrou que a física destes estados quasi-estacionários é nova. Apesar da invariância conforme não estar presente o espectro de evolução do modelo é muito parecido ao da fase conforme que delimita este ponto especial. O nosso estudo do modelo PARPM para $U \neq 1$ permitira o estudo da física dos estados estacionários no caso geral. Neste caso, em que esperamos a invariância conforme não existir será interessante ver as características físicas dos estados quasi-estacionários, se os mesmos existirem, o que acreditamos ser o caso.

Palavras-chave: Teoria de campos conforme. Transições de fase em estados absorventes. Estados metaestáveis .

Referências:

1 DE GIER, J.; NIENHUIS, B.; PEARCE, P.; RITTENBERG, V. The raise and peel model of a fluctuating interface. **Journal of Statistical Physics**, v. 114, n. 1-2, p 1-35, 2004.

2 ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. A conformal invariant growth model. **Journal of Statistical Mechanics**, n. 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**, p. 09030, 2011. Doi:10.1088/1742-5468/2011/09/P09030.

PG38

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

CARVALHO JUNIOR, Paulo de Sousa¹; ELLENA, Javier Alcides¹

paulo.sousa@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A depressão é um distúrbio afetivo que se apresenta em diferentes classes clínicas, psíquicas e físicas. Devido à acentuada prevalência e consequências tal como mortalidade e custos sociais, a doença tem se tornado uma prioridade da saúde pública. No tratamento, a classe dos Inibidores de Recaptação de Serotonina (ISRS) são os fármacos mais utilizados e prescritos no mundo. Isso se deve a relevância terapêutica e a redução de efeitos indesejados. (1) A Fluoxetina, $C_{17}H_{18}F_3NO$, (FLX) e a Paroxetina, $C_{19}H_{20}FNO_3$, (PRX) são potentes ISRS farmaceuticamente administrados na forma de cloridratos. Considerando que diferentes formas sólidas de um mesmo composto apresentam diferentes propriedades físico-químicas, o desenvolvimento de novas formas sólidas de insumos farmacêuticos ativos tem se tornado uma ferramenta importante para a otimização das suas propriedades farmacocinéticas o que contribui para o desenvolvimento de medicamentos aprimorados. (2) Neste trabalho foram desenvolvidas sais nitrato dos fármacos Paroxetina e Fluoxetina. A preparação destes se fez pela precipitação estequiométrica de cloretos pelo emprego de $AgNO_3$. Os sólidos cristalinos obtidos foram caracterizados utilizando as técnicas de difração de raios X por monocristal. O nitrato de Paroxetina ($PRX+NO_3^-$) cristaliza no grupo espacial monoclinico não-centrossimétrico C_2 com duas espécies iônicas. A unidade $PRX+NO_3^-$ forma interações intermoleculares fortes do tipo $N1-H...O2 [x, +y-1, +z]$ formando cadeias infinitas que se propagam ao longo do eixo cristalográfico b organizando vacâncias onde se acomodam moléculas de água. Estas, por sua vez, contribuem para a estabilidade da estrutura cristalina tridimensional ao reduzir a repulsão entre íons de mesma carga. Em comparação à forma cloridratada, observa-se uma cela unitária de maiores dimensões devido à flexibilidade conformacional da molécula de PRX assim como ao aumento no número de ligações de hidrogênio proporcionado pelo íon NO_3^- . O Nitrato de Fluoxetina ($FLX+NO_3^-$) cristaliza num grupo espacial ortorrômbico não-centrossimétrico $Pca2_1$ com dois íons independentes de $FLX+$ na unidade assimétrica. Os confômeros ($FLX+$ (a) e $FLX+$ (b)) presentes nela diferem-se pela rotação de 180 na orientação relativa ao grupamento amina. Estes dois estados de mínima energia conformacional são regras para coexistência de dois confômeros de FLX na rede cristalina. O arranjo entre estes criam vacâncias onde se acomodam íons nitrato originando cadeias infinitas nas quais se ligam sucessivamente íons $NO_3^-(a)...FLX+(a)...NO_3^-(b)...FLX+(b)$ ao longo do eixo a. Levando em consideração as diferenças nos volumes ocupados pelos íons cloreto e nitrato assim como as diferentes características apresentadas pelas estruturas cristalinas é de se esperar que os novos sais aqui apresentados possuam uma solubilidade maior quando comparada com a apresentada pelas respectivas formas sólidas utilizadas atualmente pela indústria farmacêutica. Os dados provenientes da análise estrutural aqui reportados serão comparados com os provenientes de outras técnicas de caracterização tais como análise térmica, espectroscopia vibracional assim como estudos de avaliação de solubilidade e estabilidade.

Palavras-chave: Polimorfismo. Inibidores seletivos de recaptação de serotonina. Cristalotafia.

Referências:

- 1 VALLADARES, A; DILLA, T.; SACRISTAN, J. A. Depression: a mortgage social. lastet advances in knowledge of the cost of disease. **Acta Espanolas de Psiquiatria**, v.37, n.1, p.49-53, 2009.
- 2 WOUTER, J.; QUÉRÉ, L. **Pharmaceutical salts and Co-crystals**. Cambridge: RSC Publishing, 2012. ISBN: 978-1-84973-158-4 .

PG39

Avaliação do potencial de sequestro e emissão de CO_2 na cultura de cana-de-açúcar segundo diferentes manejos do solo

CARVALHO, Camila Miranda¹; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira²; LA SCALLA JÚNIOR, Newton³; FIGUEIREDO, Eduardo Barretto³; FERREIRA, Edilene⁴
camilamc@sc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação

³Unesp Jaboticabal

⁴Unesp Araraquara

A emissão de CO_2 , o principal gás do efeito estufa, teve crescimento de 80% entre 1970 e 2004, e nos últimos 10 anos apresentaram emissão muito maior que nos anos anteriores. (1) As práticas agrícolas são responsáveis por 40,9% da emissão desses gases. (1) O CO_2 emitido pelo solo é produzido essencialmente pela respiração das raízes das plantas e decomposição da matéria orgânica promovida pela ação dos microrganismos. A matéria orgânica do solo (MOS) representa 5% ou menos da composição do solo, mas é a principal responsável pela qualidade física e química deste, e está diretamente relacionada à nutrição das plantas e sustentabilidade agrícola. Dados recentes mostram que o Brasil é o maior produtor de cana-de-açúcar e sua área de cultivo tem se expandido, principalmente devido à crescente demanda por etanol. No manejo da cana-de-açúcar, há duas práticas mais comuns: manejo tradicional, que envolve a queima da cana visando facilitar a colheita manual (CQ), e a colheita mecanizada, ou cana crua (CC), com incorporação da palhada no solo. Estima-se que 80% da colheita seja convertida em CC nos próximos 10 anos. Neste contexto pesquisas são importantes para elucidar como a qualidade da MOS está relacionada com as perdas de carbono do solo por meio da emissão de CO_2 , nos tipos de manejo. No que se refere ao sequestro de carbono pelo solo, é fundamental avaliar sua estabilidade, seja ela devido a estrutura química das substâncias orgânicas presentes no solo, ou a proteção do carbono dentro dos microagregados. (2) Nosso objetivo 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. Este estudo foi conduzido em áreas da Usina Ipiranga, Mococa-SP, com 5 anos de cultivo de cana-de-açúcar SP81-3250, e solo tipo Argissolo Vermelho-Amarelo. In situ registramos a emissão de CO_2 , durante seis dias no período pós-colheita e inicial de crescimento da cultura, ao mesmo tempo aferimos a umidade do solo e sua temperatura. Em laboratório determinamos o carbono total do solo e medimos a fluorescência induzida por laser do solo inteiro. (3) Resultados preliminares mostraram variações pouco significativas para os dados de emissão de CO_2 , temperatura e umidade. O solo sob o manejo de CQ mostrou uma porcentagem de carbono total de 28 a 16% maior na superfície, e menor de 9 a 0.7% na profundidade com relação a CC. Já o índice de humificação da MOS foi 47 a 1.7% maior na CC. É possível que a presença de cinzas na superfície da CQ tenham elevado seu carbono total. Novas medidas na mesma área e em outras áreas sob cultivo de cana serão realizadas para confirmar estas informações. Caso seja confirmada, este pode ser um indicativo que a incorporação de matéria orgânica fresca no solo nem sempre pode ser uma boa estratégia para acúmulo de carbono devido possivelmente a

um efeito priming. Novos métodos de manejo deverão ser testados para tornar o manejo da CC ambientalmente mais sustentável.

Palavras-chave: Espectroscopia. Sequestro de carbono. Matéria orgânica.

Referências:

- 1 IPCC. CLIMATE change 2007: synthesis report. Disponível em: <http://www.ipcc.ch/pdf/assessment-report/ar4/syr/ar4_syr.pdf>. Acesso em: 14 ago. 2012.
- 2 SZAKÁCS, G. G. J. **Estoques de carbono e agregados do solo cultivado com cana-de-açúcar:** efeito da palhada e do clima no centro-sul do Brasil. 2007. 106 f. Tese (Doutorado em Ciências) Centro de Energia Nuclear na Agricultura, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2007.
- 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.

PG40

Aplicações das nanopartículas no tratamento e diagnóstico do câncer

CARVALHO, Carina Miranda¹; ZUCOLOTTI, Valtencir¹

carinamc@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Inúmeras técnicas são utilizadas hoje no tratamento e diagnóstico do câncer, algumas dessas técnicas são demasiadamente invasivas causando danos não só as células e tecidos comprometidos pela doença, mas aos tecidos e órgãos saudáveis. A Nanotecnologia tem-se mostrado um importante instrumento à medicina, já que busca principalmente minimizar o prejuízo ao organismo agindo de modo específico a doença. Um dos principais desafios na área de Nanomedicina está na localização seletiva dentro das células cancerígenas para diagnóstico ou tratamento. Partículas de óxido de ferro, além de proporcionar o contraste em imagens de Ressonância Magnética, podem ser exploradas para guiar o agente teranóstico ao local de interesse, por meio de um campo magnético externo. A localização das células tumorais na Hipertermia Magnética é feita através da funcionalização das nanopartículas superparamagnéticas como a magnetita e as nanopartículas de Au com ligantes proteicos específicos para alvejar as células do tumor. Este trabalho visa o estudo da aplicação das nanopartículas como agente diagnóstico e terapêutico aliado a um campo magnético variável no combate ao câncer. As nanopartículas são expostas a um campo magnético alternado, o que provoca a elevação da temperatura na célula, fornecendo calor ao tumor em uma faixa de temperatura entre 42 e 46 °C, o que causa apoptose celular e consequente necrose do tecido. (1) Os metais (Au, Ag, Fe, Co) são utilizados como agentes teranósticos, sendo o nanomaterial magnetita o mais utilizado por exibir menor toxicidade que outros materiais magnéticos. (1) O nosso objetivo de análise será verificar o comportamento das nanopartículas sujeitas à um campo magnético, quanto a sua eficiência como agente diagnóstico e terapêutico no combate ao câncer e sua nanotoxicidade no organismo.

Palavras-chave: Nanopartículas. Campo magnético. Câncer.

Referências:

1 TERRENO, E; UGGERI, F; AIME, S. Image guided therapy: the advent of theranostic agents. **Journal of Controlled Release**, v. 161, n. 2, p. 8, 2012. DOI:10.1016/j.jconrel.2012.05.028.

PG41

Grafos e redes complexas em análise de imagens e visão computacional

CASANOVA, Dalcimar¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

dalcimar@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Embora as redes complexas sejam aplicadas com muito sucesso em diferentes áreas do conhecimento, entre elas a computação (arquitetura, inteligência artificial e redes) (1) poucos são os trabalhos que empregam redes complexas na extração de características de imagens para posterior análise ou classificação. Segundo (1), dada uma imagem é possível modelá-la como uma rede, extrair características topológicas e, utilizando-se dessas medidas, construir o classificador desejado. Visando explorar essa nova área de pesquisa, esse estudo objetiva o estudo e desenvolvimento de novos métodos baseados na teoria de redes complexas para visão computacional, processamento de imagens e análise de imagens, em especial métodos que utilizam características topológicas das redes para tal. As atividades de pesquisa (no tangente à visão computacional e RC) concentram-se, basicamente, dois aspectos: (1) métodos para modelar imagens como uma RC (e.g. os vértices são formados por elementos de uma imagem e arcos representam relações entre tais elementos); (2) desenvolvimento de técnicas de reconhecimento de padrões/análise de imagens baseadas em redes (onde se utiliza aspectos topológicos da rede como características). Dentre os diversos resultados obtidos temos a análise de contorno (2) onde, para aplicar a teoria de redes complexas no problema uma representação do contorno deve ser construída na forma de um grafo. Nesse sentido cada pixel do contorno é representado como um vértice na rede. Um conjunto de arestas não direcionadas conectando cada vértice é então adicionado à rede e o peso de cada aresta é dado pela distância euclidiana. A caracterização do contorno dá-se então por um conjunto de características de diversas redes obtidas por um conjunto de thresholds. A extração de características de texturas é outra interessante aplicação que pode ser realizada utilizando grafos. (3) Para tal é necessário modelar a textura como um grafo e posteriormente extrair algumas características topológicas. A proposta é utilizar uma modelagem do tipo lattice conectada por um raio. A ideia central é considerar cada pixel como um vértice e conectar todos os vértices se os pixels que esses representem estão à uma determinada distância. Para cada aresta um peso é associado sendo esse a distância Euclidiana entre os dois pixels/vértices conectados mais a diferença de intensidade dos mesmos normalizados. Essa modelagem nos permite incluir informações de contexto ao redor dos pixels, que reflete em uma análise de textura local. A caracterização da textura dá-se então por um conjunto de características de diversos subgrafos obtidos por um conjunto de thresholds.

Palavras-chave: Redes complexas. Contorno. Textura.

Referências:

- 1 COSTA, L. F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G.; VILLAS BOAS, P. R. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2007.
- 2 BACKES, A. R.; CASANOVA, D.; BRUNO, O. M. A complex network-based approach for boundary shape analysis. **Pattern Recognition**, v. 42, n. 1, p. 54-67, 2009.

3 BACKES, A. R.; CASANOVA, D.; BRUNO, O. M. Texture analysis and classification: a complex network-based approach. **Information Science**, July 2012. In press.

PG42

Imagem por contraste de fase e transferência parcial e imagem por absorção

CASTELO BRANCO, Cora¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹

coracb@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Nos nossos últimos experimentos, nós estudamos algumas consequências da natureza superfluida de um Condensado de Bose-Einstein. Utilizando uma excitação oscilatória introduzida através de campos magnéticos, nós apresentamos uma nova técnica para gerar vórtices. Recentemente, demonstramos que esta técnica é útil também para produzir um estado de turbulência quântica no BEC. Além da geração de vórtices existe outra possível maneira de induzir o estado de turbulência que seria o counter flow (fluxo de corrente contrário entre a nuvem térmica e a parte condensada dos átomos), fenômeno que estamos procurando também investigar. O meu trabalho consiste em montar um sistema de imagem de alta resolução e implementar duas técnicas para executar as medidas, uma já conhecida Contraste de Fase (1-2) e outra, desenvolvida recentemente, Transferência Parcial e Imagem por Absorção (3) e comparar a funcionalidade de ambas no regime que temos no laboratório. A vantagem de usar estas técnicas está no fato de serem não-destrutivas.

Palavras-chave: Condensado de Bose Einstein. Sistema de imagem. PTAL.

Referências:

1 KETTERLE, W.; DURFEE, D. S.; STAMPER-KURN, D. M. **Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates**. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/cond-mat/9904034v2.pdf>>. Acesso em: 20 ago. 2012.

2 ANDREWS, M. R., MEWES, M.-O., VAN DRUTEN, N. J., DURFEE, D. S., KURN, D. M., KETTERLE, W. Direct, Nondestructive observation of a Bose condensate. **Science**, v.273, n.5271, p.84-87, 1996.

3 RAMANATHAN, A., MUNIZ, S. R., WRIGHT, K. C., ANDERSON, R. P., PHILLIPS, W. D., HELMERSON, K., CAMPBELL, G. K. **Partial-transfer absorption imaging**: a versatile technique for optimal imaging of ultracold gases. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1206.7048>>. Acesso em: 20 de ago. 2012.

PG43

Análises termodinâmicas de um condensado aprisionado: caracterização do sistema experimental

Thermodynamical analysis of a trapped BEC: characterization of the experimental setup

CASTILHO, Patrícia Christina Marques¹; POVEDA-CUEVAS, Freddy Jackson¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹; MAREGA JUNIOR, Euclides¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
patricia.cmcastilho@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo das propriedades termodinâmicas de uma Condensado de Bose-Einstein aprisionado a partir da utilização de novas variáveis globais (1) foi iniciado por nosso grupo no ano passado. (2) Neste experimento, um condensado de átomos de ^{87}Rb era produzido em uma armadilha magnética do tipo QUIC. Desta forma, foi possível construir um diagrama de fase para uma nova variável global relacionada com a pressão hidrostática, a qual chamamos de "parâmetro de pressão". Neste diagrama foi possível observar uma mudança de comportamento ao cruzarmos a linha da transição da nuvem térmica para o regime quântico degenerado. Esta mudança no comportamento do "parâmetro de pressão" pode ser utilizada para estudar a ordem da transição de fase. Com isto em mente, decidimos estender o estudo das propriedades termodinâmicas do condensado para o caso de diferentes geometrias da armadilha, utilizando uma armadilha híbrida (3), composta pela sobreposição de uma armadilha magnética de quadrupolo e uma armadilha óptica de feixe focalizado. Neste trabalho, apresentamos a caracterização de tal sistema experimental.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Átomos frios. Aprisionamento atômico.

The study of the thermodynamical properties of a trapped Bose-Einstein Condensate, following the theoretical proposal of defining new global variables (1), was already initiated by our group in. (2) In that experiment, a BEC of ^{87}Rb atoms was produced in a QUIC trap. It was then possible to build a phase diagram for a new global variable related to the hydrostatic pressure, which we called the pressure parameter. It was possible to see a difference in the behavior of this parameter when it crosses the transition line from the thermal cloud to the quantum degenerate regime. This change on its behavior can be used to explore the order of the phase transition. With this in mind, here we extend these thermodynamical studies of the condensate cloud to different geometries of the trap, using a hybrid trap (3), composed by the combination of a magnetic and an optical dipole trap. In this paper we present the characterization of our experimental setup.

Keywords: Bose-Einstein condensation. Cold Atoms. Trapping.

Referências:

1 ROMERO-ROCHÍN, V. Equation of state of an interacting Bose gas confined by a harmonic trap: the role of the harmonic pressure. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 13, p. 130601, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.130601.

- 2 ROMERO-ROCHÍN, V. et al. **BEC phase diagram of a ^{87}Rb trapped gas in terms of macroscopic thermodynamic parameters.** Disponivel em: <<http://arxiv.org/pdf/1102.4642v1.pdf>>. Acesso em: 02 ago. 2012.
- 3 LIN, Y. J. et al. Rapid production of ^{87}Rb Bose-Einstein condensate in a combined magnetic and optical potencial. **Physical Review A**, v. 79, n. 6, p. 063631, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevA.79.063631.

PG44

Estudos de sistemas alostéricos através de métodos de simulação computacional

CÂMARA, Amanda Souza¹; HORJALES, Eduardo¹

amanda.camara@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Sistemas alostéricos são característicos de proteínas com um ou mais estados de equilíbrio. Nesse sentido, uma enzima passa por modificações de sua atividade quando um substrato cooperativo se liga a um estado ou outro. (1) Estes estados são reconhecidos por possuírem uma conformação mais estável e coexistirem num ensemble. Este trabalho sustenta que tais proteínas oscilem naturalmente entre esses estados. Experimentos de difração de raios-X e RMN, que proporcionam parâmetros de deslocamento anisotrópicos e tempos de relaxação de spin nuclear, já demonstram a coexistência de ambos estados em solução e descrevem o movimento como uma mudança de equilíbrio populacional dos conformeros. (2) Também é possível desenvolver métodos numéricos, como o cálculo de modos normais e a simulação de dinâmica molecular, para associar a geometria proteica a um movimento sob determinado potencial de campos de força. O sistema adotado para o desenvolvimento desses estudos é a enzima alostérica Glucosamina-6-fosfato Desaminase. Características que defendem seu uso são sua reversibilidade catalítica, rápido equilíbrio cinético e muito baixa afinidade do estado T por ligantes. Sua estrutura também já foi resolvida por experimentos de cristalografia, identificando ambos estados alostéricos. E a caracterização das mudanças estruturais entre os estados T e R está bem estabelecida, identificando diferentes subunidades a distintos graus de rotação e prevendo uma oscilação de baixa frequência entre eles. (3) Resultados obtidos neste projeto constituem: (a) uma dinâmica de 100ns partindo do estado T de toda a proteína (hexamérica) solvatada explicitamente, formando um ensemble NVT de 92000 átomos através do programa NAMD, usando o campo de forças CHARMM; (b) análise de componentes principais aproveitando esta dinâmica e usando algoritmos do programa Gromacs; (c) e análise de modos normais, em que os cálculos de minimização de energia foram feitos pelo programa Gromacs sob o campo de forças ENCADV, no vácuo. Análises desses resultados estão sendo feitas e envolvem cálculos de RMSDs e flutuações, projeções dos autovetores ao longo da dinâmica, fatores de Debye-Waller e a confirmação visual (e gráficos de distância entre resíduos) de aproximação a um estado ou outro. Como a prévia caracterização da movimentação alostérica, identificava duas subunidades para cada monômero como representativas de corpos rígidos (3), também é desenvolvida uma análise por tensores de inércia. Espera-se que, ao longo do tempo, essas subunidades se comportem como corpos quase-rígidos e correspondam a maior representatividade da transição alostérica. Assim, a caracterização dos tensores seria capaz de filtrar movimentos de mais alta frequência que constituem ruído em relação a movimentos funcionais da proteína. - Algoritmos para cálculos matriciais dos tensores foram escritos em Fortran e em TCl.

Palavras-chave: Alostерismo. Dinâmica molecular. Análise estrutural.

Referências:

1 MONOD, J.; WYMAN, J.; CHANGEUX, J. P. On the nature of allosteric transitions: a plausible model. **Journal of Molecular Biology**, v. 12, n. 1, p.88-118, 1965.

- 2 HORJALES, E.; ALTAMIRANO, M. M.; CALCAGNO, M. L.; GARRATT, R. C., OLIVA, G. The allosteric transition of glucosamine6phosphate deaminase:the structure of the T state at 2.3 angstrom resolution. **Structure with Folding & Design**, v. 7, n. 5, p. 527-537, 1999.
- 3 VILLALI, J.; KERN, D. Choreographing an enzyme's dance. **Current Opinion on Chemistry Biology**, v. 14, n. 5, p. 636-643, 2010.

PG45

Modelo de rede prediz resíduos de aminoácidos importantes para difusão de calor em Xilanases GH11

Network model predicts amino acid residues important for heat diffusion in GH11 Xylanases

CENSONI, Luciano¹; MARTINEZ, Leandro²

luciano.censoni@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química - Unicamp

O fluxo de energia térmica em proteínas não obedece as expectativas para meios isotrópicos, com alguns resíduos de aminoácidos demonstrando respostas desproporcionais aos estímulos vibracionais oferecidos. A estratégia computacional de Difusão Térmica Anisotrópica (ATD) pode determinar, por meio de experimentos modificados de Dinâmica Molecular, resíduos de aminoácidos que são notavelmente capazes de dissipar calor no resto da estrutura protéica.(1) Neste trabalho, mostramos que, modelando um conjunto de Xilanases mesofílicas e termofílicas da família GH11 como Redes Complexas de aminoácidos interagentes (2) e calculando a Centralidade de cada vértice, é possível prever vértices que correspondem a resíduos importantes na dissipação de calor, identificados pelo protocolo ATD. Calculamos, a partir de dados estruturais para um grande conjunto de proteínas não-homólogas obtidas da base de dados SCOP, os parâmetros de construção mais adequados para a modelagem de proteínas como Redes Complexas, e apontamos, por meio da medida de Centralidade, a provável correlação entre Aptidão para Difusão de Calor e outros parâmetros previamente identificados na literatura, tais como importância em interações proteína-proteína, importância na estabilização de estados de transição de enovelamento e participação no sítio catalítico.(3)

Palavras-chave: Redes complexas. Proteínas. Difusão de calor.

Vibrational energy flow in proteins has been shown not to obey expectations for isotropic media, with some amino acid residues demonstrating disproportional responses to offered vibrational stimuli. The Anisotropic Thermal Diffusion (ATD) strategy can determine, through modified Molecular Dynamics experiments, amino acid residues which are especially adept at dissipating excess heat into the rest of the protein structure. (1) Here, we show that, by modeling a set of mesophilic and thermophilic Xylanases from family GH11 as complex networks of interacting amino acids (2) and calculating the Centrality for each node, we are able to predict nodes which correspond to amino acid residues that are important in heat dissipation, as identified by the ATD protocol. We calculate, from structural data for a great number of non-homologous proteins obtained from the SCOP database, the construction parameters which are most adequate for the modeling of proteins as Complex Networks, and we point out, by means of the Centrality measurement, the likely correlation between Heat Diffusion Aptitude and other previously identified parameters obtained from the literature, such as importance for protein-protein interactions, importance for the stabilization of folding transition states and participation in the catalytic site. (3)

Keywords: Complex networks. Proteins. Heat diffusion.

Referências:

- 1 MARTÍNEZ, L.; FIGUEIRA, A. C. M.; WEBB, P.; POLIKARPOV, I; SKAF, M. S. Mapping the intramolecular vibrational energy flow in proteins reveals functionally important residues. **Journal Physical Chemistry Letters**, v. 2,n.16, p.2073-2078, 2011.
- 2 KRISHNAN, A.; ZBILUT, J. P.; TOMITA, M.; GIULIANI, A. Proteins as networks: usefulness of graph theory in protein science. **Current Protein and Peptide Science**, v.9, n. 1, p.28-38,2008.
- 3 AMITAI, G.; SHEMESH, A.; SITBON, E.; SHKLAR, M.; NETANELY, D.; VENGER, I.; PIETROKOVSKY, S. Network analysis of protein structures identifies functional residues. **Journal Molecular Biology**, v.344, n. 4, p.1135-1146, 2004.

PG46

Caracterização de nanocompósitos de nanotubos de carbono e poli(amidoamina) e aplicação em biossensores

CENTURION, Lilian Maria Pessoa da Cruz¹; CANCINO, Juliana¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹
lilian@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos últimos anos, houve um grande avanço no desenvolvimento das ciências dos materiais nanométricos, com a fabricação e a caracterização de compostos com novas propriedades mecânicas, ópticas e elétricas. Um dos atrativos da nanociência é a possibilidade de sintetizar híbridos contendo diferentes nanoestruturas, com a finalidade de se obter um produto que apresente várias características úteis em uma determinada aplicação. Como exemplo desta tendência, pode-se citar a obtenção de compósitos de nanotubos de carbono e dendrímeros, polímeros ramificados com estrutura esférica. Estes híbridos têm potencial para diversas aplicações médicas como carreadores de fármacos e genes para terapia, ou como elemento transdutor em biossensores. Embora haja trabalhos descrevendo procedimentos para a síntese destes compósitos, pouco se sabe sobre as características físico-químicas e morfológicas destes materiais, o que limita seu uso em sistemas biológicos. (1-2) Neste trabalho, apresenta-se uma ampla caracterização deste híbrido e uma proposta para sua imobilização em eletrodos modificados para biossensores amperométricos. O nanocompósito foi obtido a partir de nanotubos de carbono de parede única (SWNT) e poli(amidoamina) de gerações variáveis (PAMAM G2 e G4). Experimentos de espectroscopia de absorção eletrônica e de infravermelho mostraram evidências da formação do híbrido. Para o material contendo PAMAM G2, houve a supressão da banda em 1457 cm⁻¹, atribuída à vibração scissoring das ligações CH₂ (3) e observada no espectro do dendrímero puro, indicando a presença de moléculas ligadas. Medidas de potencial zeta revelaram que os nanocompósitos são positivamente carregados, o que possibilitou a sua imobilização em filmes automontados contendo ftalocianina tetrasulfonada de níquel (NiTsPc) como poliânion. Estas multicamadas foram usadas como eletrodos modificados em medidas de voltametria cíclica, sendo que filmes com diferentes números de bicamadas foram testados. De acordo com estes experimentos, este tipo de plataforma transdutora exibe atividade eletroquímica apenas em potenciais elevados (acima de 0,8 V), o que o torna atraente para a detecção de biomoléculas no campo de análises clínicas, com custo reduzido em relação aos métodos empregados atualmente. Com este estudo, será possível otimizar a aplicação deste nanocompósito em aplicações terapêuticas e a fabricação de biossensores baseados em transdutores nanoestruturados.

Palavras-chave: Nanotubos de carbono. Nanocompósitos. Biossensores.

Referências:

- 1 PAN, B. F.; CUI, D. X.; XU, P.; HUANG, T.; LI, Q.; HE, R.; GAO, F. Cellular uptake enhancement of polyamidoamine dendrimer modified single walled carbon nanotubes. **Journal of Biomedical & Pharmaceutical Engineering**, v. 1, n. 1, p. 13-16, 2007.
- 2 SPITALSKY, Z.; TESIS, D.; PAPAGELIS, K.; GALIOTIS, C. Carbon nanotube-polymer composites: chemistry, processing, mechanical and electrical properties. **Progress in Polymer Science**, v. 35, n. 3, p. 357-401, 2010.

3 DEUTSCH, D. S.; SIANI, A.; FANSON, P. T.; HIRATA, H., MATSUMOTO, S.; WILLIAMS, C. T.; AMIRIDIS, M. D. FT-IR investigation of the thermal decomposition of poly(amidoamine) dendrimers and dendrimer-metal nanocomposites supported on Al₂O₃ and ZrO₂. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 111, n. 11, p. 4246-4255, 2007.

PG47

Estrutura atômica de clusters de Pt, Cu e ligas de PtCu: uma investigação através da teoria do funcional da densidade

CHAVES, Anderson Silva¹; PIOTROWSKI, Maurício Jeomar²; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira²
ascbonelli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Clusters metálicos subnanométricos, com dimensões entre átomos e nanopartículas, tem atraído grande atenção devido aos efeitos do confinamento quântico. (1-2) Em particular, diferentemente de nanopartículas, esses clusters exibem níveis eletrônicos discretos e, diferentemente de moléculas, esses níveis podem variar com o número de átomos ou estequiometria do sistema. Consequentemente, as propriedades físico-químicas são dependentes do tamanho e composição desses clusters fomentando o potencial para diversas aplicações desde catálise e armazenamento magnético até sensores para uso em medicina. (2) Em particular, clusters de ligas metálicas apresentam grande potencial devido à possibilidade de utilizar as características singulares de cada elemento a fim de obter um sistema com propriedades otimizadas. Por exemplo, sabe-se que ligas de *bulk* de Platina(Pt)-Cobre(Cu) apresentam melhor atividade catalítica na eletrorredução de oxigênio do que *bulk* de Pt puro. (2) Embora ligas *bulk* sejam bastante estudadas para catálise e eletroquímica, estudos sistemáticos de clusters bimetálicos, por exemplo PtCu, com potencial para aplicações catalíticas (entre outras) são muito escassos, principalmente devido à dificuldade experimental de acessar a estrutura atômica desses clusters. Neste trabalho, usando cálculos de primeiros princípios baseados na teoria do funcional da densidade dentro da aproximação do gradiente generalizado como implementado no código FHI-aims (3), investigamos a estrutura atômica, propriedades eletrônicas e reatividade, tanto de clusters puros de Pt_n e Cu_n ($n = 2 - 15$ átomos) quanto clusters bimetálicos de PtCu. Os resultados mostram que dependendo do número de elétrons de valência nas estruturas, os Cu-clusters apresentam momentos magnéticos zero ou $1 \mu_B$, sendo que esses clusters preferem estruturas planares até $n = 6$, apresentando uma transição para estruturas 3D mais compactas entre 6 e 7 átomos (como pode ser analisado através da comparação da coordenação efetiva com clusters tipo Lennard-Jones). Também, Cu-clusters apresentam comportamento semicondutor ou isolante dependendo do número de átomos, por exemplo, o HOMO-LUMO gap para Cu_5 e Cu_6 são 0,4 eV e 1,8 eV, respectivamente. Para Pt-clusters, foram encontrados três estruturas mais estáveis do que na literatura, para $n = 7, 12$ e 13 átomos. Para $n < 10$, Pt-clusters preferem estruturas planares apresentando elevados momentos magnéticos para Pt_9 e Pt_{10} (ambos com $8 \mu_B$) em contraste com o *bulk* de Pt que é não-magnético. Por outro lado, a análise do Excess energy para os clusters bimetálicos se mostrou favorável para a formação das nanoligas de PtCu embora uma elaboração mais detalhada das propriedades desses clusters ainda está em andamento.

Palavras-chave: Clusters metálicos. Nanoligas. Teoria do funcional da densidade.

Referências:

- 1 BALETTO, F.; FERRANDO, R. Structure properties of nanoclusters: energetics, thermodynamic, and kinetic effects. **Reviews of Modern Physics**, v. 77, n. 1, p. 371-423, 2005.
- 2 LU, Y.; CHEN, W. Sub-nanometre sized metal clusters: from synthetic challenges to the unique property discoveries. **Chemical Society Review**, v.41, n. 9, p. 3594-3623, 2012.
- 3 BLUM, V.; GEHRKE, R.; HANKE, F.; HAVU, P.; HAVU, V.; REN, X.; REUTER, K.; SCHEFFLER, M. Ab initio molecular simulations with numeric atom-centered orbitals. **Computer Physics Communications**, v. 180, p. 2175-2196, 2009. DOI:10.1016/j.cpc.2009.06.022.

PG48

Caracterização funcional da septina de *Chlamydomonas reinhardtii*

CIOL, Heloisa¹; ARAÚJO, Ana Paula Ulian¹

heloisa.ciol@usp.br

¹Universidade de São Paulo - USP

As septinas fazem parte de uma família de proteínas de ligação ao nucleotídeo guanina e já foram encontradas em nemátodes, moscas, fungos, protozoários e animais, mas nunca em plantas. Essas proteínas tem sido descritas como atuantes em processos importantes como a citocinese, reorganização do citoesqueleto, dinâmica de membranas, tráfego de vesículas e exocitose, embora seu modo de ação nesses processos seja ainda pouco entendido. Além disso, as septinas mostraram-se capazes de se polimerizar em heterofilamentos altamente organizados, a partir da interação com outras septinas. (1) Em contraste, há escassas referências à existência e funcionalidade de homofilamentos de septinas, sendo que este tema ainda carece de comprovação. A dificuldade em avançar no entendimento dos homofilamentos está, em parte, no fato dos organismos estudados até o momento apresentarem várias septinas diferentes. Contrastando com os organismos estudados até o momento, a alga unicelular *Chlamydomonas reinhardtii*, um eucarionte modelo que divergiu há muito do ancestral comum a plantas e metazoários, possui uma única septina, podendo assim auxiliar no estudo de homofilamentos de septinas. (2) Este fato, associado à facilidade de se trabalhar com um organismo cujos protocolos de cultivo e transformação estão bem estabelecidos, torna *Chlamydomonas reinhardtii* um modelo atraente também para o estudo de septinas in vivo. Para isso, será realizada a busca proteínas parceiras que interagem com a septina pela técnica de duplo-híbrido, utilizando-se uma biblioteca de cDNA da própria alga. Ainda, propõe-se realizar o silenciamento gênico para a septina de *C. reinhardtii*, através do uso de micro-RNAs artificiais (amiRNAs), uma técnica recente e bastante eficaz para estudos de função gênica, cujos resultados em *C. reinhardtii* tem se mostrado bastante promissores. (3) Assim, pretende-se contribuir com o esclarecimento da questão fundamental da atuação de septinas como homofilamentos funcionais, bem como determinar o papel primordial que esta proteína desempenha em *C. reinhardtii*.

Palavras-chave: *Chlamydomonas reinhardtii*. Septina. Função.

Referências:

- 1 SHEFFIELD, P. J.; OLIVER, C. J.; KREMER, B. E.; SHENG, S.; SHAO, Z.; MACARA, I. G. Borg/septin interactions and the assembly of mammalian septin heterodimers, trimers, and filaments. **Journal of Biological Chemistry**, v. 278, n. 5, p. 3483-3488, 2003.
- 2 WLOGA, D.; STRZYZEWSKA-JÓWKO, I.; GAERTIG, J.; JERKA-DZIADOSZ, M. . Septins stabilize mitochondria in *Tetrahymena thermophila*. **Eukaryotic Cell**, v. 7, n. 8, p. 1373-1386, 2008.
- 3 MOLNAR, A.; BASSETT, A.; THUENEMANN, E.; SCHWACH, F.; KARKARE, S.; OS-SOWSKI, S.; WEIGEL, D.; BAULCOMBE, D. Highly specific gene silencing by artificial microRNAs in the unicellular alga *Chlamydomonas reinhardtii*. **The Plant Journal**, v. 58, n. 1, p. 165-174, 2009.

PG49

Engenharia de cristais aplicada ao preparo de sais de hale- tos de Lamivudina.

CLAVIJO, Juan Carlos Tenorio¹; ELLENA, Javier Alcides¹

juanct@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A AIDS (Síndrome da Imunodeficiência Adquirida) é uma doença que afeta milhões de pessoas no mundo inteiro. A lamivudina, β -L-2',3'-didesoxi-3'-tiocitidina (3TC), é um fármaco antirretroviral inibidor de nucleosídeos da transcriptase reversa (INTR). Este Insumo é um dos principais componentes do coquetel de drogas utilizado atualmente no tratamento desta doença. (1) Este insumo farmacêutico ativo (IFA) apresenta um número expressivo de formas sólidas diferentes reportadas na literatura, entre elas as formas anidra e monoidratada dos sais halogenados do fármaco 3TC. (2) Baseando-se na organização supramolecular apresentada por estas duas formas sólidas, foram desenhados e obtidos dois sais halogenados de 3TC, sendo estes o bromidrato e o fluoridrato, respectivamente. Estas novas formas sólidas cristalizam no grupo espacial não-centrossimétrico P21. Trata-se de formas cristalinas isoestruturais cuja principal diferença refere-se ao tamanho do radio de Van der Waals dos íons halógenos. A conformação supramolecular das unidades catiônicas de 3TC⁺ é a mesma, permitindo a formação de vacâncias ao longo do eixo a decorrente da simetria helicoidal característica do grupo espacial. Como resultado destas vacâncias, os anions acomodam-se estabilizando o arranjo cristalino. Esta estabilização acontece maximizando as interações intermoleculares e minimizando as forças repulsivas entre os pares iônicos. É importante resaltar que embora os arranjos cristalinos sejam semelhantes, as energias de interação e, portanto, de estabilização da rede cristalina, variam significativamente de um sal para outro, dependendo da natureza do contra-íon que se incorpora. Utilizando-se da engenharia de cristais, pôde-se preparar sais do fármaco 3TC que sejam isoestruturais com os sais de hidrocloreto. Tendo em consideração tais características, estes sais podem apresentar uma maior solubilidade de equilíbrio em comparação com a forma polimórfica neutra. (3) Portanto isto permitiria maior disponibilidade na hora da liberação do fármaco, e deixaria uma via livre para realizar futuros testes de biodisponibilidade.

Palavras-chave: Antirretroviral. Engenharia de cristais. Solubilidade.

Referências:

- 1 DE CLERQ, E. Anti-HIV drugs: 25 compounds approved within 25 years after the discovery of HIV. **International Journal of Antimicrobial Agents**, v. 33, n. 4, p. 307-320, 2009.
- 2 ELLENA, J.; PAPARIDIS, 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.
- 3 MARTINS, F. T.; BONFILIO, R.; ARAUJO, M. B.; ELLENA, J. Lamivudine salts with improved solubilities. **Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 101, n. 6, p. 2143-2154, 2012.

PG50

Aproximação analítica para simulações dos efeitos de movimentos moleculares em sinais de RMN de separação de campo local

COBO, Márcio Fernando¹; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro¹

marciofcobo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Dinâmica Molecular e as características estruturais de um material correlacionam-se diretamente com muitas de suas propriedades macroscópicas, tais como: transporte e propriedades ópticas de polímeros semicondutores; comportamento mecânico de borrachas; atividades de proteínas; estabilidade de fármacos; transporte iônico em vidros; entre muitos outros exemplos. Dentre as técnicas usadas para estudar Dinâmica Molecular, Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é conhecida por ser altamente seletiva tanto do ponto de vista de sítios químicos quanto de frequência. Além disso, outra vantagem da RMN é a existência de diversas sequências de pulsos que, juntamente com programas de simulação de Dinâmica de spins, podem ser utilizadas para se quantificar parâmetros dinâmicos do sistema em estudo. Nesse sentido, é de fundamental importância que o desenvolvimento de uma nova sequência de pulsos seja acompanhado de uma modelagem computacional, a fim de que tal sequência possa ser utilizada para quantificar algum parâmetro dinâmico. Porém, comumente o desenvolvimento de um programa simulação mostra-se mais desafiador do que a própria implementação da sequência de pulsos, de modo que esse empecilho pode inviabilizar o uso da nova técnica pela comunidade científica. Isso deve-se à elaborada matemática, física e programação envolvidas em tais programas, pois esses resolvem numericamente a equação de Liouville-von Neumann, considerando tanto interações de spin (responsáveis pela evolução quântica do sistema de spins) quanto os efeitos dos movimentos moleculares (responsáveis pela evolução estocástica do sistema de spins). Assim sendo, aproximações analíticas se tornam interessantes, pois essas requerem menores habilidades computacionais, físicas e matemáticas; além de demandarem muito menos tempo para o cálculo de uma "simulação". Neste trabalho, propusemos uma nova abordagem computacional para a quantificação de experimentos de DIPSHIFT (*Dipolar Chemical Shift Correlation*) e sua variante t_c -recDIPSHIFT (*Time Constant Recoupled DIP-SHIFT*) ambos utilizados para o estudo de dinâmica molecular no regime intermediário, regime no qual as taxas de movimento variam entre centenas de Hz até centenas de kHz. (1) Tal abordagem computacional baseia-se na aproximação de Anderson e Weiss, a qual assume uma distribuição gaussiana para o campo local sentido pelo núcleo em estudo. (2) Além disso, para sistemas com mais de dois spins, como por exemplo grupos CH_2 e CH_3 , utilizamos o formalismo proposto por Terao e colaboradores, que decompõe o campo local (aqui assumido gaussiano) em uma composição de campos locais equivalentes à interação de um único par CH. (3) Por fim, verificamos os limites de validade de nossa aproximação analítica através da comparação de seus resultados com os oriundos de simulações de Dinâmica de spins, inclusive considerando os efeitos dos movimentos moleculares.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Dinâmica molecular. Aproximação analítica de AW com multi gaussianas.

Referências:

- 1 HONG, M.; GROSS, J. D.; RIENSTRA, C. M.; GRIFFIN, R. G.; KUMASHIRO, K. K.; SCHMIDT-ROHR, K. Coupling amplification in 2D MAS NMR and its application to torsion angle determination in peptides. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 129, n. 1, p. 85-92, 1997.
- 2 ANDERSON, P. W.; WEISS, P. R. Exchange narrowing in paramagnetic resonance. **Reviews of Modern Physics**, v. 25, n. 1, p. 269-276, 1953.
- 3 TERAOKA, T.; MIURA, H.; SAIKA, A. Dipolar SASS NMR spectroscopy: separation of heteronuclear dipolar powder patterns in rotating solids. **Journal of Chemical Physics**, v. 85, n. 7, p. 3816-3826, 1986.

PG51

Estudo de pré-tratamentos da biomassa e da interação enzimática por meio de técnicas espectroscópicas e de microscopia óptica de alta resolução

COLETTA, Vitor Carlos¹; CONCEIÇÃO, Fernando Rodrigues da¹; REZENDE, Camila Alves de¹; POLIKARPOV, Igor¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹
vitor.coletta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A atividade enzimática sobre a biomassa lignocelulósica produz açúcares que podem ser fermentados para a produção de etanol de segunda geração. (1) Para que enzimas tenham acesso à celulose de forma eficiente, pré-tratamentos para remoção de hemicelulose e lignina da biomassa são cruciais. (2) A interação dessas enzimas com o substrato também é influenciada por fatores como o pH. Um dos objetivos deste trabalho é investigar por metodologias ópticas os efeitos de um pré-tratamento ácido seguido por um pré-tratamento alcalino em bagaço de cana-de-açúcar. (3) Outro objetivo é estudar a interação da enzima Celobiohidrolase Cel7A (ou CBH I) e de seus domínios com fibras de polpa de eucalipto para diferentes valores de pH. Foram utilizadas a espectroscopia de fluorescência e as microscopias confocal e de imagem de tempo de vida da fluorescência (FLIM). Uma correlação foi observada entre o tempo de decaimento da fluorescência e o conteúdo de lignina no bagaço, além de uma inomogeneidade significativa na parede celular após o pré-tratamento alcalino, indicando que este é mais efetivo em domínios de lignina pouco agregada. A interação da CBH I com as fibras de eucalipto é mais forte para pH ácido e tem contribuição tanto do módulo de ligação à celulose (CBM) quanto do domínio catalítico. Imagens de microscopia confocal mostram que as enzimas penetram nas paredes das fibras.

Palavras-chave: Celulose. Pré-tratamentos. Microscopia.

Referências:

- 1 HIMMEL, M. E. et al. Biomass recalcitrance: engineering plants and enzymes for biofuels production. **Science**, v. 315, n. 5813, p. 804-807, 2007.
- 2 HENDRIKS, A. T. W. M.; ZEEMAN, G. Pretreatments to enhance the digestibility of lignocellulosic biomass. **Bioresource Technology**, v. 100, n. 1, p. 10-18, 2009.
- 3 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, p. 1-18, 2011. DOI:10.1186/1754-6834-4-54 .

PG52

Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares

COMIN, Cesar Henrique¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

chcomin@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de redes complexas tem despertado muita atenção nos últimos anos, principalmente pela sua capacidade de permitir a análise dos mais diversificados sistemas através de um mesmo conjunto de ferramentas matemáticas e computacionais. (1-2) Até pouco tempo a ênfase nessa área era sobre o estudo das propriedades estruturais e sua influência em características globais da dinâmica ocorrendo sobre o sistema. Recentemente foi-se percebendo a riqueza de comportamentos que podemos estudar ao olharmos para grupos de vértices e as interações que ocorrem entre esses grupos, inserido nesse contexto estão os modelos de redes comunitárias que possibilitam o estudo de forma sistemática da relação estrutura modular e dinâmica em sistemas complexos. Com isso em mente abordamos neste trabalho a influência da modularidade topológica na modularização da dinâmica, isto é, que condições a estrutura deve seguir para que a dinâmica dos nós sejam diferenciadas na rede. Daremos especial ênfase ao que ocorre na modularização da dinâmica quando adicionamos direção nas relações entre os elementos que compõe o sistema (3), pois existem poucos resultados para essa classe de problema na literatura.

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

Referências:

- 1 LOVÁSZ, L. Random walks on graphs: a survey. In: ERDOS, Paul. **Combinatorics**. Keszthely:Hungary Mathematical Society,1993. v.2. p.1-46.
- 2 NOH, J. D.; RIEGER, H. Random walks on complex networks. **Physical Review Letters**,v. 92, p.118701,2004.DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.118701.
- 3 FORTUNATO, S.; FLAMMINI, A. Random walks on directed networks: the case of the Pagerank. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v.17, n.7, p.2343,2007.

PG53

Caracterização de gêneros musicais por redes complexas

CORRÊA, Débora Cristina¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

debcris.cor@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O constante crescimento de dados musicais na Internet tem atraído pesquisas para o desenvolvimento de ferramentas adequadas para analisar e classificar dados musicais. O objetivo principal de tais ferramentas é extrair informação necessária e compacta para bem representar o conteúdo de banco de dados musicais. Nesse contexto, gêneros musicais são importantes descritores, pois além de serem usados há anos para organizar coleções musicais e refletirem interação entre culturas, resumem características (ou padrões) comuns entre peças musicais. O objetivo principal do trabalho é, portanto, propor uma maneira original e de baixo custo computacional para representar os gêneros musicais. Como mecanismos de representação, redes complexas tem se mostrado ferramentas eficientes para caracterizar e complementar o entendimento de muitos aspectos presentes no cotidiano. A análise de suas características topológicas contribuem para uma melhor compreensão das relações, propriedades e características inerentes de objetos de interesse. Portanto, a motivação do projeto está na possibilidade de uma melhor análise das características de um gênero musical e como essas características se relacionam, através do estudo das comunidades e medidas topológicas de uma rede complexa construída com músicas de diferentes gêneros. Também é proposto comparar as informações obtidas pelo uso de redes complexas com a técnicas tradicional de agrupamento de dados conhecida como agrupamento hierárquico aglomerativo. Exemplos de abordagens anteriores que utilizam redes complexas e detecção de comunidades para representar aspectos musicais são (1-3). Neste trabalho, são comparadas comunidades obtidas por diferentes algoritmos de agrupamento e medidas de distância, definindo uma abordagem não supervisionada e diferenciada pela inclusão de medidas topológicas na análise dos dados. Cada música é representada por um vetor de probabilidades condicionais das durações das notas presentes na percussão, uma vez que o ritmo é inerentemente adequado para representar os gêneros. Medidas para avaliar os grupos obtidos no desempenho em capturar as características inerentes dos dados são utilizadas com o objetivo de validar os resultados. Observa-se que o uso de redes complexas pode beneficiar a análise e discriminação dos gêneros musicais. Por fim, a caracterização dos gêneros musicais é analisada a luz de um contexto musical estendido representado pelos motivos musicais, que são definidos como pequenas sequências de notas ou rítmicas que se repetem com certa frequência em uma composição musical.

Palavras-chave: Gêneros musicais. Ritmo. Grafos.

Referências:

1 GLEISER, P. M.; DANON, L. Community structure in jazz. **Advances in Complex Systems**, v. 6, n. 4, p. 565-573, 2003.

2 LIU, X. F.; TSE, C. K.; SMALL, M. Complex network structure of musical compositions: algorithmic generation of appealing music. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, v. 389, n. 1, p. 126-132, 2010.

3 TEITELBAUM, T.; BALENZUELA, P.; CANO, P.; BULD, J. M. . Community structures and role detection in music networks. **Chaos**, v.18, n.043105, 2008.DOI:10.1063/1.2988285.

PG54

Síntese de um módulo de comunicação Ethernet em hardware digital para transferência de dados em três velocidades

CORRÊA, Rodrigo Rafael Melaré¹; MARTINS, Mateus José¹; TANNÚS, Alberto¹

rodrigormcorrea@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com base nas vantagens agregadas da técnica de imagem por Ressonância Magnética Nuclear (RM), o Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética (CIERMag) está desenvolvendo um Espectrômetro Digital de Ressonância Magnética com proposta de utilização, entre outras, em um scanner de RM (Projeto ToRM15).(1) Sabendo que o espectrômetro necessita trocar uma quantidade alta de dados com o computador onde serão processados os dados, chamado de console de operação, este trabalho visa fornecer uma conexão de alta velocidade para a transferência de dados entre ambas as partes. O módulo de comunicação está sendo desenvolvido na linguagem de descrição de hardware *Very High Speed Integrated Circuits Hardware Description Language* (VHDL) e permitirá ao grupo deter a propriedade intelectual sobre a tecnologia.(2) Tais itens fazem parte da política do CIERMag. O objetivo específico desse projeto é prover, ao Espectrômetro Digital, um dispositivo de comunicação de dados que permita a transferência de dados em três velocidades diferentes (1000, 100 e 10 Mbps) e que utilize inicialmente o protocolo UDP, para que seja incorporado ao lado dos subsistemas já existentes de USB *High Speed* e *Full Speed*.(3) Com isto, o hardware programável (FPGA) ao executar uma sequência de pulsos compilada, utilizando nossa linguagem de programação "F" de sequências de pulsos, poderá manipular os sinais de Ressonância Magnética e enviá-los ao console de controle, para processamento e visualização. Como ferramenta de desenvolvimento, foi utilizada a plataforma Quartus II cujo fornecedor é a Altera. A verificação e validação do sistema estão sendo feitas em um kit de desenvolvimento DE3 150 da Terasic, o qual utiliza uma FPGA Stratix III, também da Altera. Este kit fornece suporte para a integração de periféricos externos, sendo assim foi acoplada uma placa HSMC NET, a qual prove um *link* de transmissão de dados em multivetocidades utilizando um chip físico (PHY) que converte o sinal digital, vindo da FPGA, para um sinal analógico utilizado para transmitir na camada física de rede. Uma versão anterior do sistema, que teve partes desenvolvidas em Verilog e partes desenvolvidas em VHDL, está sendo utilizada nos testes do espectrômetro do CIERMag, o qual está transmitindo dados como esperado. Além disso, foram feitos testes de bancada para recepção e transmissão de pacotes ETHERNET. Estes apresentaram resultados compatíveis com sistemas de transmissão Ethernet permitindo a interação com outro computador disponível na rede. Notamos, porém, que em uma rede composta de varios computadores, houve casos com excesso de pacotes *broadcast* circulando pela rede. Isto gerou *overflows* isolados fazendo com que o sistema perdesse uma quantidade mínima de pacotes, fato que pode ser vital para a formação da imagem de RM. Sabendo dos problemas que devem ser tratados em uma rede não exclusiva, o CIERMag definiu anteriormente que o espectrômetro, juntamente com seu console de controle, ficará em uma rede local isolada.

Palavras-chave: Espectrômetro. Ethernet. Ressonância magnética.

Referências:

- 1 CALLAGHAN, P. **Principles of nuclear magnetic resonance microscopy**. Oxford: Clarendon Press, 1991.
- 2 BOBDA, C. **Introduction to reconfigurable computing: architectures, algorithms, and applications**. Dordrecht: Springer-Verlag, 2007.
- 3 SPURGEON, C. E. **Ethernet: the definitive guide**. Cambridge: O'Reilly, 2000.

PG55

Células fotovoltaicas híbridas: arquiteturas baseadas em efeitos fotônicos e plasmônicos

COUTINHO, Douglas José¹; FARIA, Roberto Mendonça¹

douglas@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Esse projeto tem por objetivo a fabricação de células fotovoltaicas de terceira geração, isto é, tendo como camada ativa filmes finos de polímeros eletrônicos combinados com materiais inorgânicos eletronegativos. Para isso, usaremos estruturas envolvendo um eletrodo transparente (ITO, por exemplo), uma camada transportadora de buracos (PEDOT:PSS), e como camada ativa, polímeros eletrônicos (da família dos politiofenos ou dos polifenileno-vinilenos) combinados com nanopartículas de TiO₂ ou de fulerenos, e finalmente um contato elétrico de alumínio e cálcio. Essas estruturas de dispositivos têm sido denominadas de híbridas.(1) Efeitos plasmônicos e fotônicos de superfície serão produzidos para aumentar a eficiência dos dispositivos. Nessas células, a separação de carga fotoinduzida é facilitada pela grande área interfacial entre doador e receptor, e filmes híbridos vêm mostrando ótimas eficiências de fotoconversão. A diminuição da recombinação de carga devido às nanopartículas é o fator mais importante para aumentar a eficiência dessas células. A absorção de luz por um semiconductor gera um elétron em um estado excitado e um buraco na banda de valência, formando um éxciton, que tem energia de ligação de vários eV e podem migrar por cerca de 10nm antes de se recombinar. Contudo se os elétrons excitados são transferidos para uma espécie receptora, a absorção da luz pode resultar em geração de fotocorrente. O subsequente processo de condução se dá por diferentes processos: condução de buracos através da cadeia polimérica, via hopping, e dos elétrons através de nanopartículas, também por hopping. Essa separação espacial de cargas é crucial para a eficiência de fotoconversão. As nanopartículas - no caso, TiO₂ - apresentam alta afinidade eletrônica, atuando como receptores de elétrons quando combinadas a polímeros condutores, evitando a recombinação de cargas.(2) É importante destacar que a transferência de carga se dá entre um éxciton previamente fotogerado e a nanopartícula. A transferência de elétrons fotogerados do segmento polimérico para a nanopartícula diminui a taxa de recombinação em processos radiativos. A recombinação molecular também diminui devido à diferença de mobilidade entre os portadores.

Palavras-chave: Dispositivos fotovoltaicos orgânicos. Efeito fotônico. Efeito plasmônico.

Referências:

- 1 DENNLER, G.; SCHARBER, M. C.; BRABEC, C. J. Polymer-fullerene bulk-heterojunction solar cells. **Advanced Materials**, v. 21, n. 34, p. 1323-1338, 2009.
- 2 PARK, D. H.; KIM, M. S.; JOO, J. Hybrid nanostructures using pi-conjugated polymers and nanoscale metals: synthesis, characteristics, and optoelectronic applications. **Chemical Society Reviews**, v. 39, n. 7, p. 2439-2452, 2010.

PG56

MRSA ST5-SCCmecII e sua SLV ST105-SCCmecII demonstram caráter endêmico em hospital de Belo Horizonte

DABUL, Andrei Nicoli Gebieluca¹; CORSI, Waldomiro Thiago¹; BOGNI, Simoni Camila¹; MARCELLO JUNIOR, Hyllo Baeta²; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha¹
andabul@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Geraldo Lustosa Laboratório Médico

O rastreamento de linhagens de *Staphylococcus aureus* resistente à Meticilina (MRSA) é uma ferramenta necessária para monitorar a disseminação e detectar possíveis surtos deste importante patógeno nosocomial. (1) No presente estudo, 36 amostras de MRSA isoladas de 23 pacientes no período de julho a dezembro de 2009 num hospital de Belo Horizonte, 25 provenientes de focos de infecção e 11 de colonização, foram caracterizadas por PFGE, MLST, tipagem SCCmec e triagem para detecção de h-VISA. Nenhuma das amostras era VISA ou h-VISA. PFGE dividiu todas elas em 8 pulsotipos. Análises por MLST e tipagem de SCCmec do pulsotipo A e seus subtipos, equivalente a 58,3% das amostras, indicaram que suas linhagens pertencem ao CC5 (ST5 e ST105) e contêm SCCmecII. O mesmo foi encontrado para pulsotipos B e C. Os tipos D e E, contêm apenas amostras do CC5, porém com SCCmec variados. Observou-se uma prevalência de linhagens do CC5 dentre as amostras de infecção, 54% pertencendo ao ST5 e 29% ao ST105. Quatro amostras do estudo pertencem a outros CCs, 3 ST239 e 1 ST97, este último usualmente associado à mastite bovina. (2) Todas ST239 apresentam SCCmecIII, relacionando-se ao Clone Brasileiro Endêmico (BEC). Das 13 amostras ST5, 12 tem SCCmecII, como o clone NY/J e apenas 1 tem SCCmecIV, como o clone Pediátrico. Nos últimos anos, uma mudança da linhagem prevalente nos hospitais brasileiros tem sido reportada, com BEC sendo substituído pela linhagem mundialmente disseminada, a ST5-SCCmecII e suas single locus variants. (3) BEC não era prevalente neste hospital em 2009 e os quadros de infecção por MRSA mostram prevalência das linhagens ST5-SCCmecII e ST105-SCCmecII. No entanto, não há disseminação de um genótipo idêntico detectável por PFGE sugerindo um surto; houve modificação genética ao longo do tempo sugerindo caráter endêmico das linhagens neste hospital.

Palavras-chave: *Staphylococcus aureus*. Tipagem molecular. Complexo clonal 5.

Referências:

- 1 OLIVEIRA, D. C.; TOMASZ, A.; DE LENCASTRE, H. The evolution of pandemic clones of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*: Identification of two ancestral genetic backgrounds and the associated *mec* elements. **Microbial Drug Resistance**, v. 7, n. 4, p. 349-361, 2001.
- 2 SMITH, E. M. et al. Multilocus sequence typing of intercontinental bovine *Staphylococcus aureus* isolates. **Journal of Clinical Microbiology**, v. 43, n. 9, p. 4737-4743, 2005.
- 3 CARMO, M. S. et al. New multilocus sequence typing of MRSA in São Paulo, Brazil. **Brazilian Journal of Medical and Biological Research**, v. 44, n. 10, p. 1013-1017, 2011.

PG57

Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida

DE CASTRO, Leonardo Andreta¹; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹

leonardo.castro@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Estudaremos o processo de medida de um conjunto de bits quânticos (qubits) sujeito a perturbações produzidas pelo ambiente. O processamento de informação quântica requer uma evolução temporal determinística do estado inicial seguida de uma medição sobre o sistema de qubits. Descreveremos o processo completo que envolve a perturbação e as medidas de forma unificada, através de uma equação mestra híbrida não-markoviana (1), dentro da aproximação em que as perturbações ambientais são suficientemente pequenas, conforme é esperado no caso de um computador quântico funcional. Essa equação mestra generalizada descreve simultaneamente a evolução do estado quântico e o processo de medida, considerado de duração finita, o que permite o estudo da ação conjunta do aparato de medida e do ruído. Baseado em estudos anteriores de nosso grupo (2), e na teoria de proteção de erros por efeito Zenão quântico (3), abordaremos as propriedades protetivas da medida aplicadas à preservação de um estado ao qual se aplica a uma porta lógica. Combinaremos esse estudo com a teoria quântica de correção de erros, de forma a determinar quais medidas de síndrome são adequadas para proteger cada estado. Compararemos tais resultados com aqueles de um sistema em que as medidas de síndrome são executadas não continuamente, mas através de uma série de passos próximos entre si. Verificaremos que modificações as portas lógicas precisam sofrer para que esse método de passos curtos seja aplicável, dando atenção para como eventuais hamiltonianas não-físicas devam ser simuladas. Finalmente, verificaremos se os resultados obtidos pelo método contínuo representam o limite do caso discreto.

Palavras-chave: Informação quântica. Teoria de correção de erros. Medidas de tempo finito.

Referências:

- 1 BRASIL, C. A.; NAPOLITANO, R. d. J. The master equation for the reduced open-system dynamics, including a Lindbladian description of finite-duration measurement. **The European Physical Journal Plus**, v. 126, n. 10, p. 91, 2011. DOI:10.1140/epjp/i2011-11091-y. .
- 2 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. d. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, v. 84, n. 2, p. 022112, 2011. DOI: 10.1103/PhysRevA.84.022112.
- 3 EREZ, N.; AHARONOV, Y.; REZNIK B.; VAIDMAN, L. Correcting quantum errors with the Zeno effect. **Physical Review A**, v. 69, n. 6, p. 062315, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevA.69.062315.

PG58

Evolução temporal da robustez e modularidade de redes ósseas

DORO NETO, Carlos¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

carlos.doro.neto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Ossos corticais, essenciais para estrutura, proteção de órgãos e suporte mecânico em muitos animais, possuem um grande número de canais organizados de maneira intrincada. Usando o estado da arte em técnicas de análise de imagens, computação gráfica e reconstrução 3D, ossos de galinhas são obtidos e representados em uma rede onde cada canal é associado a uma aresta e cada junção de três ou mais canais é associada a um nó. Esta representação permite a realização de diferentes medidas e a aplicação de vários métodos a fim de analisar e caracterizar a formação e o desenvolvimento das redes de canais. Este projeto trata-se da continuação do trabalho desenvolvido por M. P. Viana, L. da F. Costa et al. (1) sobre modularidade e robustez de redes ósseas, onde a relação entre a robustez da rede e sua estrutura modular é demonstrada. Busca-se entender aqui a evolução temporal desta estrutura ao longo de diferentes faixas etárias, e seu impacto em sua própria robustez.

Palavras-chave: Estruturas ósseas. Redes complexas. Reconstrução 3D.

Referências:

1 VIANA, M. P.; TANCK, E.; BELETTI, M. E.; COSTA, L. DA F. Modularity and robustness of bone networks. **Molecular BioSystems**, v. 5, n. 3, p. 255-261, 2009. DOI: 10.1039/b814188f.

PG59

Síntese e caracterização do sistema do $\text{La}_{(0,02)}\text{Sr}_{(0,98)}\text{Ti}_{(x)}\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 15$, % mol) utilizando o método dos precursores poliméricos.

ESCANHOELA JUNIOR, Carlos Augusto¹; BERNARDI, Maria Inês Basso¹; MASTELARO, Valmor Roberto¹
escanhoela@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os materiais de estrutura perovskita, ABO_3 , compreendem um grupo de compostos que apresenta um alto grau de flexibilidade em acomodar uma variedade de átomos nos sítios A e B, permitindo controlar algumas propriedades físicas e químicas do material. O controle destas propriedades permite que tais materiais possam ser aplicados como capacitores, varistores, fotoeletrodos, memórias ferroelétricas ou sensores de gás. (1) O titanato de estrôncio, SrTiO_3 , é um dos material de estrutura perovskita que tem sido amplamente estudado devido a sua possível aplicação como sensor de gás. A substituição do Ti^{+4} pelo Fe^{+3} e do Sr^{+2} pelo La^{+3} , formando a solução sólida $\text{La}_{(1-y)}\text{Sr}_{(y)}\text{Ti}_{(x)}\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}_3$, pode melhorar a sensibilidade e seletividade do material como sensor de gás devido a geração de defeitos estruturais. (2) Na etapa inicial do projeto, nanopartículas de $\text{La}_{(0,02)}\text{Sr}_{(0,98)}\text{Ti}_{(x)}\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 15$, % mol) foram sintetizadas na forma de pó através do método dos precursores poliméricos. (3) As amostras foram caracterizadas por difração de raios-X (DRX), calorimetria diferencial de varredura (DSC) e por microscopia eletrônica de varredura (MEV). Os difratogramas de raios-X indicam a presença de uma fase única referente ao ST de estrutura cúbica do grupo espacial $\text{Pm}3\text{m}$. As curvas de DSC revelam a presença de dois picos exotérmicos, o primeiro entre 200-400 °C referente à eliminação de material orgânico, característico do método de síntese, e o segundo entre 550-650 °C atribuído a cristalização do material. As imagens de microscopia eletrônica revelaram um alto grau de aglomeração das partículas. A síntese através do método dos precursores poliméricos mostrou-se eficiente para obtenção do $\text{La}_{(0,02)}\text{Sr}_{(0,98)}\text{Ti}_{(x)}\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 15$, % mol), com fase única. Essas amostras na forma de pó serão utilizadas como alvo para a deposição de um filme fino utilizando a técnica de deposição por feixe de elétrons (EBD) e, posteriormente, os filmes serão submetidos a testes de sensibilidade ao gás ozônio.

Palavras-chave: Perovskita. Método dos precursores poliméricos. Sensores de gás.

Referências:

- 1 FERGUS, J. W. . Perovskite oxides for semiconductor-based gas sensors. **Sensor and Actuators B**, v. 123, n. 2, p. 1169-1179, 2007.
- 2 MENESKLOU, W.; SCHREINER, H. J.; HARDTL, K. H.; IVERS-TIFEE, E. High temperature oxygen sensors based on doped SrTiO_3 . **Sensor and Actuators B**, v. 59, n.2, p. 184-189, 1999. .
- 3 DA SILVA, L. F.; BERNARDI, M. I. B.; MAIA, L. J. Q.; FRIGO, G. J. M., MASTELARO, V. R., . Synthesis and thermal decomposition of $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.1$) powders obtained by the polymeric precursor method. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 97, n.1, p. 173-177, 2009.

PG60

Transformada wavelet aplicada na extração das características do ruído emitido pela caneta ao assinar

ESCOLA, João Paulo Lemos¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco¹

jpescola@ursa.ifsp.edu.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A biometria é o processo de validação do ser humano por meio de suas características, sejam elas fisiológicas ou comportamentais. A assinatura é o processo comumente utilizado quando for necessário validar uma pessoa em documentos ou registros formais. O processamento digital de sinais (PDS) busca manipular e interpretar características de sinais como áudio e voz. Este artigo aborda a manipulação do ruído emitido pela caneta durante o processo de assinatura de um indivíduo, fazendo deste um recurso adicional de validação biométrica utilizando as técnicas de PDS. Com o intuito de capturar o ruído emitido pela caneta ao assinar, foi desenvolvido um protótipo de uma caneta com um microfone embutido. A partir da coleta e armazenamento das assinaturas dos voluntários, aplica-se sobre os dados digitalizados a transformada Wavelet Packet até o seu nível máximo. A partir das frequências resultantes do sinal, é realizada uma filtragem a partir da escala Bark e posteriormente os dados são enviados para uma máquina de vetor de suporte para classificação dos indivíduos.

Palavras-chave: Wavelet. Biometria. Processamento de sinais.

Referências:

- 1 BRAVO, J. C. L. **Autenticação pessoal baseada no som da assinatura**. 2006. 113 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.
- 2 BARBON JUNIOR, S. **Dynamic time warping baseado na transformada Wavelet**. 2007. 113 f. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.
- 3 LYONS, R. G. **Understanding digital signal processing**. 2nd ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2004.

PG61

Otimização de estratégias de pré-tratamento de diferentes biomassas lignocelulósicas e suas utilizações na produção de etanol de segunda geração via hidrólise enzimática

ESPIRITO SANTO, Melissa Cristina¹; POLIKARPOV, Igor¹; SANTOS, Maria Auxiliadora Morim¹; LIMA, Marisa Aparecida de¹; NOGUEIRA, Andrea Regina dos Santos²; DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro¹
melissaespiritosanto@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

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 madeireiras. (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 subsequentes da hidrólise e fermentação. Desta forma, este trabalho tem por objetivo avaliar diferentes metodologias de pré-tratamento e sua influência na estrutura e composição da biomassa, bem como na hidrólise enzimática e fermentação. Para tanto, inicialmente empregar-se-á amostras de bagaço de cana-de-açúcar cedidos pela empresa Raízen-Cosan Group (Ibaté-SP), com tratamento hidrotérmico, seguido pela caracterização da biomassa de acordo com protocolos estabelecidos (3), além do uso de microscopia eletrônica de varredura e da difração de raio-X. A etapa posterior de hidrólise será realizada em shaker sob uma agitação de 200 rpm e a 50°C. A quantidade de glicose liberada será medida por um cromatógrafo de íons do sistema (DX-500, Dionex, Sunnyvale, CA, EUA), equipado com detecção amperométrica pulsada e uma coluna de troca aniônica CarboPac PA1. Como fase móvel será utilizada uma solução de hidróxido de sódio 10 mM, utilizando a glicose e celobiose como padrões. Por fim, para análise de fermentação será aplicado cepas das leveduras *S. cerevisae*, obtidas comercialmente e mantidas por repiques periódicos em meio de cultivo adequado. A fermentação ocorrerá em frascos de erlenmeyers em shaker, por agitação de 200 rpm e posteriormente serão transferidos a reatores. Espera-se conseguir bons resultados com este tratamento, pois o mesmo apresenta alto potencial para ser empregado em escala industrial.

Palavras-chave: Bioetanol. Biomassa. 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, set. 2008.
- 2 BASTOS, V. D. Etanol, alcoolquímica e biorrefinarias. **BNDES Setorial**, n. 25, p. 5-38, mar. 2007.
- 3 ROCHA, G. J. M. et al. Dilute mixed-acid pretreatment of sugarcane bagasse for ethanol production. **Biomass and Bioenergy**, v. 35, n. 1, p. 663-670, Jan. 2011.

PG62

Caracterização molecular e estrutural da selenoproteína T (SelT) de *Trypanosoma brucei*

EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti¹; BELLINI, Natália Karla²; THIEMANN, Otavio Henrique¹
jaque@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centro de Ciências Biológicas e da Saúde - UFSCar

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 atualmente um total de 22 aminoácidos.(1) O aminoácido selenocisteína (Sec) representa a principal forma biológica de selênio. O repertório completo de genes envolvidos na via de síntese do Sec em eucariotos, e em particular em protozoários, não é totalmente conhecido e em Kinetoplastidae foram identificadas três selenoproteínas, SelT, SelK e Sel *Tryp*.(2) A proteína SelT de *T. brucei* possui 259 aminoácidos, massa molecular de 29KDa e predições indicam 3 regiões transmembrânicas. Nesta proteína, o Sec está localizado no meio da sequência de aminoácidos, na posição 108 e sua real função não foi até o momento determinada o que nos desperta o interesse em estudá-la. Então sintetizamos o gene selt através da empresa GenScript com os melhores códons para expressão heteróloga em *Escherichia coli* e clonado no vetor pUC57. Nós subclonamos nos vetores pET 28 and pET 29 com as enzimas de restrição apropriadas para posteriormente ligação e transformação em células de *E. coli* e assim, a expressão da proteína SelT. A proteína é expressa em células de *E. coli* BL21 e induzidas com 0,5 mM de IPTG permanecendo por 5 horas a 37°C. A lise celular e solubilização é realizada em tampão acrescido de 1% do detergente Sarcosil, o que confere a estabilidade proteica. Sua purificação consiste em duas resinas: afinidade por níquel e exclusão molecular Superdex 75. Ensaio de cristalização pelo método gota sentada (do inglês, sitting drop) foram realizados com Kits comerciais para proteínas de membrana e os estudos de oligomerização adequados para este tipo de proteína serão realizados.

Palavras-chave: Selênio. Selenoproteínas. SelT.

Referências:

1 LEHNINGER, A.; NELSON, D. L.; COX, M. M. **Lehninger**: principles of biochemistry. 3rd ed. New York: Worth Publishers, 2000. p. 1037-1043.

2 LOBANOV, A.V.; HATFIELD, D. L.; GLADYSHEV, V. N. Eukaryotic selenoproteins and selenoproteomes. **Biochimica et Biophysica Acta**, v. 1790, n. 11, p.1424-1428, 2009.

PG63

Estruturas cristalográficas da selenofosfato sintetase de *Trypanosoma brucei* e *Leishmania major*

FAIM, Livia Maria¹; SILVA, Ivan Rosa e¹; PEREIRA, Humberto D'Muniz¹; DIAS, Marcio Vinicius Bertacine²; THIEMANN, Otavio Henrique¹

livia_faim@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Laboratorio Nacional de Biociências - CNPEM

Selenocisteína (Sec), conhecido como o 21º aminoácido do código genético, é a principal forma ativa do selênio. Sec é cotraducionalmente incorporado em proteínas designadas selenoproteínas em resposta ao códon UGA. Embora, UGA seja normalmente um códon de terminação que indica a parada da síntese de proteínas, este também é usado como um códon para Sec por vários organismos. A incorporação específica de Sec em selenoproteínas requer a participação da enzima selenofosfato sintetase (SPS2), a qual catalisa a formação do doador de selênio reativo, monoselenofosfato a partir de seleneto e ATP. (1) Estudos recentes identificaram a presença da via de biossíntese de Sec em Kinetoplastidas. As SPS2 de *Trypanosoma brucei* (TbSPS2) e *Leishmania major* (LmSPS2) foram caracterizadas bioquimicamente. (2) Experimentos de RNA de interferência validaram a SPS2 como essencial para a proteção do parasita contra estresse oxidativo. (3) Estruturas da SPS de *Aquifex Aeolicus*, *Escherichia coli* e SPS1 humana foram reportadas, elucidando possíveis mecanismos de reação para SPS. Porém, as estruturas de SPS2 de parasitos ainda não foram elucidadas e questões envolvendo o mecanismo de catálise das SPSs devem ser investigadas. Neste trabalho, reportamos a cristalização, estudos de difração de raios X e análises iniciais da estrutura cristalográfica das formas apo de TbSPS2 e LmSPS2 truncada. Cristais de TbSPS2 foram obtidos pelo método de *microbatch* e a estratégia de uma nova construção a partir da técnica de proteólise in situ levou à formação de cristais para LmSPS2. Dados de difração de raios X em monocristais de TbSPS2 e LmSPS2 truncada foram coletados na Diamond Light Source, Didcot, UK. O processamento dos dados foi feito pelo programa IMOSFLM e as fases foram determinadas pelo método de substituição molecular através do software PHASER utilizando como modelo de busca a estrutura cristalográfica de código PDB 3FD5. Subseqüentes refinamentos e construção do modelo foram realizados pelos programas PHENIX e COOT. Cristais de TbSPS2 e LmSPS2 difrataram a 3,2 Å e 1,9 Å, respectivamente. O empacotamento cristalino de TbSPS2 pertence ao grupo espacial P6422, $a = 110,72 \text{ Å}$, $b = 110,72 \text{ Å}$, $c = 142,57 \text{ Å}$ e o da LmSPS2 ao I212121, com parâmetros de cela $a = 55,95 \text{ Å}$, $b = 81,69 \text{ Å}$ e $c = 177,92 \text{ Å}$. O refinamento final da LmSPS2 resultou em $R_{\text{work}} = 17,3\%$ e $R_{\text{free}} = 20,8\%$. A determinação da estrutura da TbSPS2 está em andamento. As análises e comparação dessas estruturas poderão fornecer informações para o entendimento do mecanismo de reação e o processo evolutivo dessas enzimas.

Palavras-chave: Selenocisteína . Selenofosfato sintetase. Cristalografia de raios X.

Referências:

- 1 TURANOV, A. A.; XU, X. M.; CARLSON, B. A.; YOO, M. H.; GLADYSHEV, V. N.; HATFIELD, D. L. Biosynthesis of selenocysteine, the 21st amino acid in the genetic code, and a novel pathway for cysteine biosynthesis. **Advances in Nutrition**, v. 2, n. 2, p. 122-8, 2011.
- 2 SCULACCIO, S. A.; RODRIGUES, E. M.; CORDEIRO, A. T.; MAGALHÃES A.; BRAGA, A. L.; ALBERTO, E. E.; THIEMANN, O. H. Selenocysteine incorporation in Kinetoplastid: selenophosphate synthetase (SELD) from de *Leishmania major* and *Trypanosoma brucei*. **Molecular Biochemistry Parasitology**, v. 162, n. 2, p.165-71, 2008.
- 3 COSTA, F. C.; OLIVA, M. A.; DE JESUS, T. C.; SCHENKMAN, S.; THIEMANN, O. H. Oxidative stress protection of Trypanosomes requires selenophosphate synthase. **Molecular Biochemistry Parasitology**, v. 180, n. 1, p.47-50, 2011.

PG64

Spin-órbita em semicondutores wurtzita: uma análise da banda de condução

FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

fariajunior.pe@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Uma maneira interessante de observar a manifestação do acoplamento spin-órbita em sistemas semicondutores é através dos campos magnéticos internos. Esses campos, intrínsecos ao material, existem sem influência externa de campos elétricos ou magnéticos, e induzem uma separação nas bandas de energia que depende do vetor $\vec{k}$ do espaço recíproco. Esses efeitos na estrutura de bandas contribuem significativamente para a relaxação e decoerência de spin, fenômenos fundamentais que influenciam a operação de dispositivos spintrônicos. (1-2) Embora diversos estudos teóricos e experimentais já tenham sido realizados para cristais com estrutura zinblend, o número de estudos na literatura para cristais com estrutura wurtzita é muito menor. (2) Cristais com estrutura wurtzita tem sido muito utilizados recentemente para o crescimento de estruturas do tipo *nanowhiskers*, ou *nanowires*, nanoestruturas unidimensionais com amplas aplicações tecnológicas. (3) Este trabalho investiga os efeitos da interação spin-órbita na banda de condução de semicondutores com estrutura wurtzita, utilizando o formalismo do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Incluindo os termos relativísticos, até segunda ordem pelo método perturbativo de Löwdin, obtemos um Hamiltoniano efetivo para banda de condução ao redor do ponto Γ . Nosso modelo exhibe a anisotropia entre as direções k_x e k_y . No entanto, os parâmetros utilizados para o InP e o InAs não refletem essa propriedade. Além do estudo dos efeitos da assimetria de inversão *bulk* (BIA, do inglês *Bulk Inversion Asymmetry*) em poços quânticos simétricos, a assimetria de inversão estrutural (SIA, do inglês *Structural Inversion Asymmetry*) também é estudada considerando os efeitos de polarização piezoelétrica e campos elétricos externos estáticos.

Palavras-chave: Spin-órbita. Wurtzita. Método k.p.

Referências:

- 1 ZUTIC, I.; FABIAN, J.; DAS SARMA, S. Spintronics: fundamentals and applications. **Reviews of Modern Physics**, v. 76, n. 2, p.323, 2004.DOI: 10.1103/RevModPhys.76.323.
- 2 WU, M. W.; JIANG, J. H.; WENG, M. Q. Spin dynamics in semiconductors. **Physics Reports**, v. 493, n. 2-4, p. 61, 2010. DOI:10.1016/j.physrep.2010.04.002.
- 3 DUBROVSKII, V. G.; CIRILINA, G. E.; USTINOV, V. M. Semiconductor nanowhiskers: synthesis, properties, and applications. **Semiconductors**, v. 43, n. 12, p.1585, 2009.DOI: 10.1134/S106378260912001X.

PG65

Planejamento racional de novos inibidores das enzimas aldolase e fosfofrutoquinase de *Trypanosoma brucei*

FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes¹; THIEMANN, Otavio Henrique¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹
leonardo@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As doenças tropicais negligenciadas, que atingem as populações mais carentes do mundo, representam em termos humanitários e socioeconômicos uma grande preocupação global. Dentre estas, as tripanossomíases estão entre as doenças parasitárias mais importantes, e particularmente a Tripanossomíase Africana ou Doença do Sono, destaca-se como uma doença fatal, causada pelo parasita unicelular *Trypanosoma brucei*. (1) Dentre os potenciais alvos metabólicos considerados para o desenvolvimento de novos fármacos para as tripanossomíases, a glicólise surge como uma via promissora em função de seu papel vital no processo gerador de ATP da forma sanguínea do parasita. Este trabalho visa identificar novos inibidores de duas enzimas da via glicolítica de *Trypanosoma brucei*: Aldolase (EC 4.1.2.13) e Fosfofrutoquinase (EC 2.7.1.11). Inibidores destas enzimas são candidatos a novos agentes terapêuticos com alto potencial de desenvolvimento clínico, visto que os respectivos alvos macromoleculares são validados para o planejamento de novos fármacos. A estratégia utilizada envolve o uso de métodos de planejamento baseados na estrutura do receptor em conjunto com aqueles baseados na estrutura dos ligantes, para a identificação de inibidores seletivos das enzimas-alvo, através da integração de métodos computacionais e experimentais. Foram desenvolvidas, neste projeto, várias etapas de planejamento, que incluem o desenvolvimento de protocolos de expressão e purificação para as enzimas alvo, ensaios de cinética enzimática, além do desenvolvimento de experimentos *in silico*, tais como o ensaio virtual em larga escala, o desenvolvimento de relações quantitativas entre estrutura e atividade e estudos de dinâmica molecular. A integração destes diferentes métodos resultou na identificação de uma nova série de moléculas que estão sendo avaliadas como potenciais inibidores da fosfofrutoquinase e de novos inibidores da enzima aldolase de *T. brucei*.

Palavras-chave: Tripanossomíase. Aldolase. Fosfofrutoquinase.

Referências:

1 RIDLEY, R. G.; FLETCHER, E. R. Making a difference 30 years of TDR. **Nature Reviews Microbiology**, v. 6, n. 5, p.401-407, 2008.

PG66

Detecção da proteína NS1 do vírus da Dengue utilizando transistores de efeito de campo de porta estendida e separada

FIGUEIREDO, Alessandra¹; VIEIRA, Nirton Cristi Silva¹; AOKI, Sergio²; ZUCOLOTTO, Valtencir¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹
afigueiredo17@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²DNApta

Detecção elétrica direta da interação antígeno-anticorpo utilizando transistores de efeito de campo (*FETs*) é uma ferramenta robusta no desenvolvimento de imunossensores. (1) Dengue é uma infecção viral transmitida pelo mosquito *Aedes aegypti*, afetando mais de 50 milhões de pessoas todo ano e ainda carece de métodos de detecção efetivos nos primeiros dias de infecção. O vírus da Dengue (*DENV*) possui um RNA de fita simples do gênero Flavivirus com quatro sorotipos diferentes (*DENV-1*, *DENV-2*, *DENV-3*, *DENV-4*), podendo ser letal em casos de Dengue Hemorrágica e Síndrome de Choque da Dengue. (2) São introduzidas técnicas alternativas a métodos como teste de imunoadsorção enzimática indireta (*ELISA*), promovendo o diagnóstico precoce e elevando a sensibilidade. O uso do *FET* de porta estendida e separada (*SEGFET*), uma alternativa de baixo custo para o *FET* íon seletivo (*ISFET*) através do isolamento do *FET* da solução, é utilizado para aumentar a detecção de carga ligada. Monocamadas automontadas (*SAMs*) sobre substrato de ouro de cisteamina e glutaraldeído foram utilizadas para imobilizar anticorpos monoclonais anti-Dengue proteína NS1. A plataforma foi também estudada através de microscopia de fluorescência de modo a obter informações da organização das *SAMs*.

Palavras-chave: Transistor de efeito de campo. Dengue. *SAMs*.

Referências:

- 1 STARODUB, N. F. Immunosensor for the determination of the herbicide simazine based on an ion-selective field-effect transistor. **Analytica Chimica Acta**, v. 424, n. 1, p. 37-43, 2000.
- 2 ZHANG, G. J. Silicon nanowire biosensor for highly sensitive and rapid detection of Dengue virus. **Sensors and Actuators B: chemical**, v. 146, n. 1, p. 138-144, 2010.

PG67**Controle coerente do processo de fotocatalise, mediada por TiO_2 , induzida por pulsos de femtossegundos**

FIGUEREDO, Tarcisio Rocha¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

tarcisiorfig@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A utilização de pulsos ultracurtos de laser vem crescendo devido ao interesse tanto do ponto de vista tecnológico quanto fundamental. Como consequência da larga banda espectral deste tipo de laser, surgiram técnicas de formatação do pulso que permitem, além da otimização do próprio pulso, o controle e manipulação da interação da luz com a matéria. Esta nova área sugere que importantes avanços no controle e entendimento da interação da luz com a matéria possam ser alcançados, permitindo, por exemplo, a obtenção de produtos ou estados moleculares que não são facilmente alcançados convencionalmente. O presente projeto visa investigar a otimização da fotocatalise mediada por TiO_2 , induzida por absorção multifotônica, através do controle coerente da interação da luz com a matéria, via formatação espectral do pulso. Para tal finalidade, usaremos como molécula de prova a rodamina B. A partir desses resultados, deveremos interpretar as modulações de fase obtidas, relacionando-as aspectos moleculares e espectroscópicos tanto do TiO_2 quanto da rodamina.

Palavras-chave: Controle coerente. Algoritmo genético. Óptica não linear.

Referências:

1 MESHULACH, D.; SILBERBERG, Y. Coherent quantum control of two-photon transitions by a femtosecond laser pulse. **Nature**, v. 396, n. 6708, p. 239-242, 1998.

PG68

Estudos de modelagem molecular de candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas

FIORAVANTI, César Maschio¹; GUIDO, Rafael Victório Carvalho¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹
cesarmaschio@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, a doença de Chagas afeta aproximadamente 18 milhões de indivíduos, principalmente na América Latina, onde é considerada um grave problema de saúde pública com consequências devastadoras em termos de morbidade e mortalidade humana.(1) O arsenal terapêutico contra a doença é bastante limitado e insuficiente em todos os aspectos clínicos. No presente trabalho de dissertação de mestrado foram selecionados dois conjuntos de dados baseados em derivados sintéticos com pronunciadas propriedades anti-*T. cruzi*. Estes amplos conjuntos, contendo dados sobre a estrutura química e a atividade biológica, serão empregados para o desenvolvimento de estudos das relações quantitativas entre a estrutura e atividade (QSAR) empregando metodologias modernas 2D e 3D. A integração dos modelos desenvolvidos com os estudos de modelagem molecular será de grande importância para o entendimento das razões moleculares da atividade biológica nestas séries de compostos e para o desenvolvimento de candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas.

Palavras-chave: Chagas. QSAR. Fármacos.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. Disponível em: <<http://www.who.int/tdr/diseases/chagas/chagas-poster.pdf>>. Acesso em: 16 ago. 2012.

PG69

Descritores fractais aplicados à análise de texturas

FLORINDO, João Batista¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

jbflorindo@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente projeto propõe o desenvolvimento, estudo e aplicações de descritores fractais em análise de textura. Nas últimas décadas, a geometria fractal (1) tem demonstrado ser uma ferramenta poderosa para a análise deste tipo de imagem, como se vê em uma série de trabalhos teóricos e aplicados na literatura. Muitas dessas soluções ainda fazem uso direto da dimensão fractal como um caracterizador da textura representada na imagem. Dada a complexidade de muitos problemas nesta área, algumas abordagens foram desenvolvidas para usar não apenas o valor da dimensão, mas um conjunto de medidas que pudessem ser extraídas pela geometria fractal e que pudessem representar as texturas com maior riqueza e precisão. Entre essas técnicas, destacam-se a metodologia de multifractais, de dimensão fractal multiescala e mais recentemente os descritores fractais. Esta última técnica tem se sobressaído na solução de problemas relacionados à discriminação de imagens de texturas e formas, uma vez que os descritores gerados fornecem um mapeamento direto do padrão multiescala de complexidade (distribuição dos detalhes ao longo das escalas de observação) da imagem. (2) Assim, essa solução permite que se tenha uma descrição rica da imagem estudada pela análise da distribuição espacial e/ou espectral dos pixels e intensidade de cores/tons de cinza, com uma modelagem que pode se aproximar da percepção visual humana para a geração de um método automático preciso. Ocorre, entretanto, que os trabalhos apresentados até o momento sobre descritores fractais focam em métodos de estimativa de dimensão fractal mais conhecidos como Bouligand-Minkowski e box-counting. Este projeto visa estudar mais a fundo o conceito, generalizando para outras abordagens de dimensão fractal, bem como explorando diferentes formas de se extraírem os descritores a partir da curva logarítmica associada à dimensão. Os métodos desenvolvidos são aplicados à análise de texturas, em problemas de classificação de bases públicas, cujos resultados podem ser comparados com métodos da literatura, bem como à segmentação de imagens de satélite e à identificação automática de amostras obtidas em estudos de nanotecnologia. (3) Os resultados alcançados demonstram o potencial da metodologia desenvolvida para a solução destes problemas, mostrando tratar-se de uma nova fronteira a ser usada e explorada em análise de imagens e visão computacional como um todo.

Palavras-chave: Descritores fractais. Análise de texturas. Reconhecimento de padrões.

Referências:

- 1 MANDELBROT, B. B. **The fractal geometry of nature**. New York: Freeman, 1968.
- 2 FLORINDO, J. B.; BACKES, A. R.; CASTRO, M. de; BRUNO, O. M. A comparative study on multiscale fractal dimension descriptors. **Pattern Recognition Letters**, v. 33, n. 6, p. 798-806, 2012.
- 3 FLORINDO, J. B.; SIKORA, M.; PEREIRA, E.; BRUNO, O. Multiscale fractal descriptors applied to nanoscale images. **Journal of Superconductivity and Novel Magnetism**, 2012. DOI 10.1007/s10948-012-1449-9. Disponível em: <<http://www.springerlink.com/content/e16343383093289g/fulltext.pdf>>. Acesso em: 02 ago. 2012.

PG70

Investigação da estrutura atômica de superfícies de platina utilizando a teoria do funcional da densidade

FREIRE, Rafael Luiz Heleno Freire¹; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira²

freire_rafaelheleno@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

A platina é um dos materiais mais estudados entre os metais de transição utilizados em catálise e eletroquímica (Ru, Rh, Pd, etc), e portanto, as superfícies de platina têm sido largamente caracterizadas através de técnicas experimentais e/ou simulações computacionais. (1-2) Devido à sua simplicidade, as superfícies de platina planas com baixos índices de Miller, (111), (100) e (110), foram largamente estudadas nos últimos anos, entretanto, existe um grande número de problemas em aberto para as superfícies com *steps* ou vicinais. As superfícies vicinais são compostas por duas regiões distintas, terraços e *steps*, (3) ou seja, existem átomos com baixa coordenação, os quais desempenham um papel muito importante em catálise e eletroquímica. Portanto, é fundamental obter uma melhor compreensão das superfícies com *steps*. Neste trabalho, vamos utilizar a teoria do funcional da densidade como implementada no VASP para caracterizar as propriedades estruturais, eletrônicas, e energéticas de superfícies planas e com *steps* de platina. Para testar a metodologia utilizada neste trabalho, realizamos um estudo sistemático das principais propriedades de superfície (relaxações atômicas, energia de superfície, função trabalho, densidade de estados) em função do número de camadas (*layers*) (1-2-3) nos *slabs* (empilhamento de *n* planos) utilizados para descrever as superfícies Pt(111), Pt(100), Pt(110). Para a energia de superfície, obtivemos os seguintes valores 0,65, 0,90 e 1,22 eV, para Pt(111), Pt(110), e Pt(100), respectivamente, tal que para esta propriedade temos Pt(110)>Pt(100)>Pt(111). Enquanto que para as funções trabalho temos: 5,70, 5,68 e 5,36 eV. Obtivemos que as superfícies compactas, como a Pt(111), praticamente não sofrem relaxação, enquanto superfícies abertas, se comparadas à esta, apresentaram relaxações significativas. O que é esperado, uma vez que superfícies com alto número de coordenação, (1-2) como no caso da Pt(111), a princípio, devem ser mais estáveis, pois têm uma área superficial exposta menor do que a de superfícies mais abertas, que em muitos casos expõem também átomos de camadas adjacentes. Devem apresentar também menor energia livre de superfície, pois têm uma menor quantidade de ligações quebradas (3, 4 e 6 ligações por átomo da superfície(3) para Pt(111), Pt(100) e Pt(110), respectivamente). Já, no caso da função trabalho, superfícies mais compactas apresentam uma maior densidade de carga superficial, o que dificulta a "retirada" de elétrons da mesma, aumentando assim a função trabalho da superfície, logo temos que a superfície (111) têm a maior função trabalho. Assim, em ordem decrescente de estabilidade da estrutura e função trabalho, temos Pt(111)>Pt(100)>Pt(110).

Palavras-chave: Platina. Superfícies. Teoria do funcional da densidade.

Referências:

1 SILVA, J. L. F.; STAMPFL, C.; SCHEFFLER, M. Converged properties of clean metal surfaces by all-electron first-principles calculations. **Surface Science**, v. 600, n. 3, p. 703-715, 2006.

2 SINGH-MILLER, N. E.; MARZARI, N. Surface energies, work functions, and surface relaxations of low-index metallic surfaces from first principles. **Physical Review B**, v. 80, n. 23, p. 235407-1-235407-9, 2009.

3 SILVA, J. L. F.; BARRETEAU, C.; SCHROEDER, K.; BLÜGEL, S. All-electron first-principles investigations of the energetics of vicinal Cu surfaces. **Physical Review B**, v. 73, n.12, p.125402-1-125402-11, 2006.

PG71

Estudos estruturais e funcionais da enzima beta-galactosidase LacZ2 de *Bifidumbacterium bifidum*

Structure and functional studies of the enzyme beta-galactosidase LacZ2 from *Bifidumbacterium bifidum*

GODOY, Andre Schutzer de¹; CAMILLO, Cesar Moisés¹; MAGRINI, Fernando Peron¹; POLIKARPOV, Igor¹

andregodoy@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As glicosil hidrolases são um grupo de enzimas que realizam a hidrólise catalítica da ligação entre carboidratos. Hoje conhecemos cerca de 120 famílias de hidrolases, sendo que podemos encontrar enzimas do tipo beta galactosidase em pelo menos cinco dessas famílias. Em especial, as beta galactosidasas atuam na hidrólise da ligação beta (1,4) entre a glicose e a galactose de uma molécula de lactose. Essas enzimas também possuem uma atividade sintética capaz de produzir oligossacarídeos, um importante prebiótico (1), a partir da transferência do grupo galactosil de uma molécula recém hidrolisada para uma nova lactose. (2) Além de estudar o mecanismo de hidrólise, pretendemos explorar a capacidade anabólica de essas enzimas produzirem galacto oligossacarídeos em reações de transferência de galactose. Para isso, iremos estudar uma de *Bifidumbacterium bifidum* pertencente à família 42 das glicosil hidrolases. Nosso foco é a compreensão da relação estrutura-função que garante a atividade dessa enzima e futuramente a manipulação das características dessa enzima. Até o momento foi possível a clonagem, purificação e a resolução da cristalográfica da enzima LacZ2 do organismo *Bifidumbacterium bifidum*, além de um complexo dessa mesma enzima com um ligante natural, a galactose. A interpretação das interações polares dos resíduos da enzima com seu substrato permitiu o desenho de mutantes para essa enzima, com o objetivo de nocautear sua atividade, a fim de compreendermos a importância de resíduos individuais para sua atividade enzimática. Também foi possível realizar a caracterização bioquímica e oligomérica dessa enzima, que serão dados importantes para a compreendermos os mecanismos dessa enzima. Com isso, nossos objetivos agora são a produção e caracterização dos mutantes, seguido da resolução da estrutura cristalográfica dos mesmos.

Palavras-chave: Cristalografia. Enzima. Bioquímica.

The glycosyl hydrolases are a group of enzymes that carry out the catalytic hydrolysis of the bounds between carbohydrate. We now know about 120 families of hydrolases, and we can found enzymes of the type beta-galactosidase in at least five of those families. In particular, beta-galactosidasas are responsible for the hydrolysis of the beta(1,4) bound between glucose and galactose in a molecule of lactose. These enzymes also have a synthetic activity capable of produce oligosaccharides, an important prebiotic (1), after the transfer of a galactosyl group of the hydrolysed molecule to a lactose. (2) Besides studying the mechanism of hydrolysis, we intend to explore the anabolic activity of these enzymes to produce galacto-oligosaccharides in a galactose transfer reaction. For this, we will study a beta-galactosidase of *Bifidumbacterium*

bifidum belonging to the family 42 of glycosyl hydrolases. Our focus is the understanding the structure-function relationship that ensures the activity and characteristics of this particular enzyme. Until now it was possible to clone, purify and solve the crystallographic structure of the enzyme crystal LacZ2 from *Bifidumbacterium bifidum*, and a complex of this same enzyme with its natural ligand, the galactose. By interpreting the interactions of polar residues of the enzyme with its substrate we will be able to design mutants for this enzyme in order to knock out its activity. Thus, we can start to understand the importance of individual residues for their enzymatic activity. It was also possible to perform biochemical and oligomeric characterization, which are important data for understanding the mechanisms of this enzyme. Now our goal is the production and characterization of mutants followed by resolution of the crystallographic structures.

Keywords: Crystallography. Enzyme. Biochemistry.

Referências:

- 1 TANIGUCHI, H. Carbohydrate active enzymes for the production of oligosaccharides. In: HOU, C. T. (Ed.). **Handbook of industrial biocatalysis**. Boca Raton: CRC Press, 2005. cap. 20, p. 1-25.
- 2 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.

PG72

Caracterização de nanoestruturas de Bi_2Te_3 preparadas pelo método solvotermico

GOLLINO, Felipe¹; MAREGA JUNIOR, Euclydes²

felipe.gollino@gmail.com

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

O telureto de bismuto denominado como isolantes topológicos, uma nova classe de matéria eletrônica (1-2) que emerge com grande potencial para abordar algumas questões básicas sobre dimensionalidade e espaço confinado, possuindo elétrons que se propagam na superfície do seu cristal evitando o interior do material, eles possuem seus spins alinhados causado pela alta interação spin-órbita (3), esse comportamento só havia sido observado em materiais sujeitos a campos magnéticos muito intensos e a temperaturas extremamente baixas, próximas do zero absoluto. Essas características, fazem dele uma promessa de novas tecnologias na áreas de computação quântica e spintrônica. O material foi preparado pelo método solvotérmico(2), dissolvendo-se o polímero PVP K-30 (polivinilpirrolidona) em etilenoglicol, inserindo então os óxidos de bismuto e telúrio (Bi_2O_3 e TeO_2 , respectivamente) e os solubilizando com ajuda de aquecimento e agitação, a mistura junto com a solução de NaOH foi vertida dentro de uma caldeira reacional de teflon e lacrada dentro de uma estrutura de aço para que pudesse ser aquecida em forno a 200°C durante 260 minutos. Após o material foi lavado com acetona e centrifugado, finalmente ele foi seco a 60°C durante 300 minutos obtendo um sedimento. A microscopia mostra uma partícula com formato hexagonal, o que era desejado. Com o dados do EDS pode garantir a presença dos metais bismuto e telúrio no local indicado, em conjunto com os dados de difratograma que confirmam os picos referentes ao alvo, indica-se a existência dos cristais de Bi_2Te_3 . A formação de nanocristais facetados é relativo a adsorção seletiva das constituintes da reação e de seus respectivos contra íons nas faces do cristal durante o processo de crescimento. O material foi preparado pelo método solvotérmico, dissolvendo-se o polímero PVP K-30 (polivinilpirrolidona) em etilenoglicol, inserindo então o os óxidos de bismuto e telúrio (Bi_2O_3 e TeO_2 , respectivamente) e os solubilizando com ajuda de aquecimento e agitação, a mistura junto com a solução de NaOH foi vertida dentro de uma caldeirinha de teflon e lacrada dentro de uma estrutura de aço para que pudesse ser aquecida em forno a 200°C durante 260 minutos. Após o material foi lavado com acetona e centrifugado, finalmente ele foi seco a 60°C durante 300 minutos obtendo um sedimento. A microscopia mostra uma partícula com formato hexagonal, o que era desejado. Com o dados do EDS pode garantir a presença dos metais bismuto e telúrio no local indicado, em conjunto com os dados de difratograma que confirmam os picos referentes ao alvo, indica-se a existência dos cristais de Bi_2Te_3 . A formação de nanocristais facetados é relativo a adsorção seletiva das constituintes da reação e de seus respectivos contra íons nas faces do cristal durante o processo de crescimento. O projeto esta no seu início, porém apresenta dados promissores a obtenção do material e estudo de suas propriedades.

Palavras-chave: Isolante topológico. Método solvotermico. Telureto de Bismuto.

Referências:

- 1 KANE, C.; MOORE, J. Topological insulators. **Physics World**, Feb.2011.Disponível em:<<http://www.physics.upenn.edu/~kane/pubs/p69.pdf>> Acesso em: 10 set. 2012.
- 2 HE, H. et al. Characterization of hexagonal Bi₂Te₃ nanosheets prepared by solvothermal method. **Solid State Communications**, v.152, n.9, p.810-815, 2012.
- 3 ZOLNERKEVIC, I. Magia superficial. **Pesquisa Fapesp**, v.192, p.44-47, 2012.

PG73

Absorção cooperativa de dois e três fótons via colisões controladas

GOMEZ, Eliceo Cortes¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

eliceocortes@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de Sao Carlos - USP

Recentemente (1), estudou-se o processo de absorção cooperativa de dois fótons via colisões em amostras de átomos frios de sódio. Verificou-se que as colisões catalizam as transições cooperativas, na medida em que os níveis de energia dos pares de átomos colidentes favorecem transições ressonantes de dois fótons. Pretendemos neste trabalho estudar, no contexto da eletrodinâmica quântica de cavidades (2), os processos de absorção cooperativa de dois e três fótons mediados por colisões controladas. Devemos considerar uma amostra atômica rarefeita no interior de uma cavidade de alto fator de qualidade, sujeita a interações ressonante e dispersiva com dois modos da cavidade, ω_a e ω_b . Um dos modos da cavidade, ω_a , será utilizado para induzir o processo ressonante de absorção de dois ou três fótons, tal que $\omega_a = \omega_0$ ou $3\omega_a = \omega_0$, respectivamente, sendo ω_0 a frequência de transição atômica. O outro modo, ω_b , deve promover um acoplamento do tipo dipolo-dipolo entre os átomos, com os quais interage dispersivamente. (3) Devemos estudar o papel das colisões controladas, descritas pelo acoplamento dipolo-dipolo entre os átomos da amostra, nos processos de absorção ressonante de dois e três fótons, descritos pelos Hamiltonianos:

Absorção cooperativa de dois fótons: $H = \omega_a a^\dagger a + \omega_b b^\dagger b + \sum_{k=1}^N [(\omega_a + \delta) |e^k\rangle \langle e^k| - (\omega_a - \delta) |g^k\rangle \langle g^k|] + \sum_{k=1}^N [g_a (|f^k\rangle \langle g^k| a + |g^k\rangle \langle f^k| a^\dagger) + g'_a (|e^k\rangle \langle f^k| a + |f^k\rangle \langle e^k| a^\dagger) + g_b (|e^k\rangle \langle g^k| b + |g^k\rangle \langle e^k| b^\dagger)]$

Absorção cooperativa de três fótons: $H = \omega_a a^\dagger a + \omega_b b^\dagger b + \sum_{k=1}^N [(2\omega_a + \delta) |e^k\rangle \langle e^k| + \omega_a |f^k\rangle \langle f^k| - (\omega_a - \delta) |g^k\rangle \langle g^k|] + \sum_{k=1}^N g_a [(|i^k\rangle \langle g^k| a + |g^k\rangle \langle i^k| a^\dagger) + g'_a (|f^k\rangle \langle i^k| a + |i^k\rangle \langle f^k| a^\dagger) + g''_a (|e^k\rangle \langle f^k| a + |f^k\rangle \langle e^k| a^\dagger) + g_b (|e^k\rangle \langle g^k| b + |g^k\rangle \langle e^k| b^\dagger)]$. Pretendemos também analisar as consequências da introdução de interações dispersivas adicionais, envolvendo modos adicionais da cavidade, nos processos de absorção cooperativa. Por exemplo, podemos considerar um terceiro modo ω_c que no caso do processo de dois fótons acople dispersivamente as transições $|g\rangle \longleftrightarrow i$ e $|e\rangle \longleftrightarrow i$.

Palavras-chave: Absorção cooperativa. Dois e três fótons. Eletrodinâmica quântica de cavidades.

Referências:

- 1 PEDROZO-PENAFIEL, E. et al. Two-photon cooperative absorption in colliding cold Na atoms. **Physical Review Letters**, v. 108, n.25, p. 253004-1 - 253004-4, 2012.
- 2 SCULLY, M.; ZUBAIRY, S. **Quantum Optics**. Cambridge: Cambridge University Press, 1997. 652p.

3 SHI-BIAO, Z.; GUANG-CAN, G. Efficient scheme for two-atom entanglement and quantum information processing in cavity QED. **Physical Review Letters**, v. 85, n. 11, p. 2392-2395, 2000.

PG74

Microestruturas com átomos de Rydberg frios

GONÇALVES, Luis Felipe¹; KONDO, Jorge Douglas Massayuki¹; CABRAL, Jader de Souza¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹
luisfelipe@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde meados da década de oitenta, houve um crescente avanço nas pesquisas envolvendo o estudo dos átomos frios e suas interações. Esse ramo da física experimental tem se mostrado cada vez mais promissor, especialmente no que diz respeito à implementações cada vez mais eficientes de sistemas quânticos complexos, voltados, por exemplo, para o desenvolvimento da computação quântica. (1) Nosso trabalho tem como proposta inicial o estudo, de forma controlada, da interação entre átomos de Rydberg em sistemas uni e bidimensionais, onde a distância da interação é sintonizada com uma precisão nunca antes alcançada. Esse tipo de interação já vem sendo estudada, apresentando resultados muito promissores (2), e com isso guiando o rumo da implementação factível de um sistema de *Qubits*, utilizando os átomos de Rydberg frios. Nosso grupo, que já possui uma bagagem científica considerável no estudo das interações e manipulações da transferência de estados quânticos (3), recentemente concluiu a implementação de um novo sistema de aprisionamento atômico totalmente óptico utilizando um laser de CO₂. Com esse novo sistema, e utilizando do artifício das microestruturas, poderemos então comprovar propostas teóricas dos mecanismos que governam as interações de longo alcance dos átomos de Rydberg e possivelmente implementar uma operação lógica, de caráter totalmente quântico, envolvendo esses átomos.

Palavras-chave: Átomos de Rydberg. Armadilha óptica. Interações de longo alcance.

Referências:

- 1 JAKSCH, D. et al. Fast quantum gates for neutral atoms. **Physical Review Letters**, v. 85, n. 10, p. 2208 - 2211, 2000.
- 2 URBAN, E. et al. Observation of Rydberg blockade between two atoms. **Nature Physics**, v. 5, n. 2, p. 110 - 114, 2009.
- 3 CABRAL, J. et al. Manipulation of quantum state transfer in cold Rydberg atom collisions. **New Journal of Physics**, v. 12, p. 093023, 2010. DOI:10.1088/1367-2630/12/9/093023.

PG75

Atividade em redes direcionadas aplicada ao reconhecimento de textura em imagens

GONÇALVES, Wesley Nunes¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

wnunes@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Análise de textura tem recebido considerável atenção nos últimos anos dado que textura é um padrão visual amplamente utilizado para descrever imagens. Embora a textura seja naturalmente compreendida pelo sistema visual humano, sua definição formal é uma tarefa difícil. Uma definição aceita na literatura considera a textura como um padrão repetido sobre uma superfície em sua forma exata ou com pequenas variações. No entanto, a textura é muito mais complexa do que esta definição. Textura pode ser formada por um conjunto de padrões, que pode ou não estar em escalas diferentes, combinados de uma maneira específica. De fato, a ausência total de padrões poderia formar uma textura, como o ruído sal e pimenta em imagens. Apesar da dificuldade em definir textura, as suas características estão diretamente ligadas as propriedades físicas dos objetos, que o torna um importante atributo para uma vasta gama de aplicações em visão computacional. Neste trabalho, é proposto um método para análise de texturas baseado em redes direcionadas e caminhadas aleatórias. Inicialmente, esse método mapeia a imagem em uma rede direcionada regular, onde cada vértice da rede representa um pixel da imagem. (1) Os vértices são conectados com seus vizinhos em um determinado raio e o peso da conexão é dado pela diferença entre os níveis de cinza. Ao aplicar uma função sobre as conexões, i.e. remover as conexões com peso menor que um dado limiar, é possível transformar a rede direcionada regular em uma rede que apresenta diferentes propriedades que dependem do limiar. Após obter a rede, caminhadas aleatórias são iniciadas em cada vértice da rede. (2) O número de visitas de cada vértice é utilizado para compor um vetor de características que descreve a imagem de textura. (3) Utilizando conhecidas bases de imagens, o método proposto demonstrou ser superior aos métodos tradicionais (e.g. descritores de Fourier, matrizes de co-ocorrência e filtros de Gabor), assim como os principais métodos atualmente (e.g. padrões locais binários e dimensão fractal local).

Palavras-chave: Análise de texturas. Redes direcionadas. Caminhadas aleatórias.

Referências:

- 1 GONÇALVES, W. N.; BACKES, A. R.; MARTINEZ, A. S.; BRUNO, O. M. Texture descriptor based on partially self-avoiding deterministic walker on networks. **Expert System with Applications**, v. 39, n. 15, p. 11818-11829, 2012.
- 2 NOH, J. D.; RIEGER, H. Random walks on complex networks. **Physical Review Letters**, v. 92, n. 11, p. 118701-118704, 2004.
- 3 BRAY, A. J.; RODGERS, G. J. Diffusion in a sparsely connected space: a model for glassy relaxation. **Physical Review B**, v. 38, n. 16, p. 11461-11470, 1988.

PG76

Terapia fotodinâmica utilizando Iluminação com pulsos ultracurtos.

GRECCO, Clóvis¹; PRATAVIEIRA, Sebastião¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹

clovis@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A utilização da terapia fotodinâmica (TFD) para o tratamento de tumores ou como terapia adjuvante tem crescido nos últimos anos. A técnica emprega o uso de um agente fotossensibilizador (FS), uma fonte de luz e o oxigênio molecular presente na célula visando à diminuição ou a completa destruição de células malignas. (1) Quando se considera o tratamento do câncer, uma das maiores preocupações é a completa eliminação do tecido tumoral. Camadas celulares alteradas e mais profundas podem não receber a dose necessária de energia para a completa morte celular devido ao limite de penetração da luz no tecido biológico. A maioria dos estudos está focada na fabricação de fármacos com banda de absorção na região do infravermelho, buscando assim, maior penetração da luz. Além disso, há que considerar outras possibilidades para aumentar o volume tecidual tratado como, por exemplo, a utilização de protocolos alternativos de iluminação. O uso de fontes de luz com pulsos ultracurtos pode ser uma opção para superar esta limitação. (2-3) O objetivo deste trabalho é a avaliação de parâmetros com pulsos ultracurtos para a utilização na TFD a fim de promover o aumento do volume tecidual tratado em comparação com fontes de luz CW. Para isto, foram realizados ensaios *in vitro* a fim de determinar a dinâmica de interação de pulsos ultracurtos ($\approx 30 \mu\text{J}$ de energia, $< 100\text{fs}$) com os fotossensibilizadores Photogem (PG) e Photodithazine (PDZ) e comparada com iluminação CW. Nos experimentos *in vivo* foi realizada a TFD em fígado sadio de ratos machos da linhagem *Wistar* divididos em 6 grupos com o intuito de variar a intensidade média mantendo a dose total de energia entregue (Intensidade média $76 - 230 \text{ mW.cm}^{-2}$, dose total 150 J.cm^{-2}). O animal foi anestesiado, foi injetado o FS e após o tempo de acúmulo máximo do fármaco no tecido, foi dado o início do procedimento de iluminação. Após trinta horas do término da iluminação, o animal foi eutanasiado, o tecido extraído e encaminhado para o procedimento histológico, onde foi fixado e corado com hematoxilina e eosina para análise da profundidade de necrose e outras possíveis alterações teciduais. Os resultados apresentados na etapa *in vitro* mostraram que o PG, quando iluminado com laser pulsado, apresenta taxa de fotodegradação maior do que quando iluminado com CW enquanto que o PDZ apresentou taxa de fotodegradação maior para o laser de CW. A análise histológica revelou que o efeito da TFD promovido pela fonte de luz pulsada, quando utilizando o PG, é maior do que o causado pelo laser CW. Este resultado mostra que a combinação da fonte de luz pulsada e PG pode ser considerada como uma válida alternativa para aumentar o volume tecidual tratado. O mesmo não foi observado para o PDZ, por este motivo, futuras análises dos mecanismos físico - químicos envolvidos serão investigadas, para avaliar a diferença de interação.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Laser pulsado. Fotodegradação.

Referências:

- 1 STAR, W.M. Light dosimetry in vivo. **Physics in Medicine and Biology**, v. 42, n.5, p. 763-787, 1997.
- 2 POGUE, B.W.; LILGE, L.; PATTERSON, M.S.; WILSON, B.C.; HASAN, T. Absorbed photodynamic dose from pulsed versus continuous wave light examined with tissue-simulating dosimeters. **Applied Optics**, v. 36, n.28, p. 7257-7269, 1997.
- 3 RAUSCH, P.C.; ROLFS, F.; WINKLER, M.R.; KOTTYSCH, A.; SCHAUER, A.; STEINER, W. Pulsed versus continuous wave excitation mechanisms in photodynamic therapy of differently graded squamous cell carcinomas in tumor-implanted nude mice. **European Archives of Oto-Rhino-Laryngology**, v. 250, n.2, p. 82-87, 1993.

PG77

Ressonância balística de spin em fios quânticos com múltiplas subbandas

HACHIYA, Marco¹; USAJ, Gonzalo²; EGUES, José Carlos¹

marco.hachiya@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Comisión Nacional de Energía Atómica de San Carlos de Bariloche, Argentina

Ressonância de spin balística foi observada experimentalmente em um fio quântico quasi-unidimensional por Frolov et al. (1) A ressonância de spin foi gerada pela combinação de um campo magnético externo estático e um campo magnético efetivo de spin-órbita oscilante devido a choques periódicos dos elétrons com os limites do fio quântico. Uma supressão do tempo característico de relaxação do mecanismo de D'yakonov-Perel é observada quando a frequência do campo magnético de spin-órbita se iguala a frequência de precessão em torno do campo magnético externo. Nesse trabalho, nós desenvolvemos um modelo que leva em conta o mecanismo de D'yakonov-Perel num fio quântico com múltiplas subbandas mais as interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus. Consideramos múltiplos espalhamentos aleatórios no operador de evolução temporal (representação de Heisenberg), dessa forma o tempo de relaxação de spin pode ser obtido calculando os valores esperados dependente do tempo dos operadores de spin. (2) Dentro do nosso modelo, a ressonância de spin ocorre próxima dos cruzamentos evitados pela interação spin-órbita nas subbandas do fio quântico com spins opostos. Curiosamente, os modelos para o potencial de confinamento apresentam características físicas diferentes. O confinamento parabólico exhibe apenas uma ressonância contrastando com o modelo de poço de potencial infinito que exhibe múltiplas ressonâncias, sendo o último de acordo com as observações experimentais.

Palavras-chave: Interação spin-órbita. Spintrônica . Relaxação de spin.

Referências:

1 FROLOV, S. M. et al. Ballistic spin resonance. **Nature**, v. 458, p. 868, 2009. DOI:10.1038/nature07873.

2 SCHLIEMANN, J.; LOSS, D.; WESTERVELT, R.M. Zitterbewegung of electronic wave packets in III-V zinc-blende semiconductor quantum wells. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 20, p. 6801, 2005.

PG78

Estudo comparativo da arquitetura dos genomas de *Schistosoma mansoni* e *Schistosoma japonicum* utilizando recursos bioinformáticos

JACINTO, Daniele Santini¹; DE MARCO, Ricardo¹

dsjdani@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A genômica comparativa pode ser dividida em 3 grandes áreas constituídas por alinhamentos completos de genomas, predição de genes e predição de regiões regulatórias. A comparação de genomas nos permite examinar os processos de evolução molecular e de filogenia. Essas comparações, quando realizadas entre espécies muito próximas, permitem a identificação de mudanças e rearranjos genômicos que ocorreram recentemente no contexto evolucionário. Focando essas análises sobre sequências de genes ortólogos, é possível verificar a existência de elementos que estejam contribuindo para mudanças funcionais desses genes. Nesse contexto evolucionário, as inserções de elementos de transposição, em especial as de retrotransposons, podem alterar a expressão gênica dos organismos, promover o silenciamento e dar origem a novos genes (1), influenciando a evolução genômica das espécies. Analisando duas espécies do gênero *Schistosoma*, *mansoni* e *japonicum*, estudos recentes sugerem que os retrotransposons non-LTR, SR2 e Pererê 3, apresentaram recentemente grande expansão em seu número de cópias no organismo de *S. mansoni* sem paralelo em *S. japonicum*. (2) Realizamos estudos mais detalhados da inserção destes retrotransposons em 2.936 pares de genes ortólogos de *S. mansoni* e *S. japonicum*, analisando a posição das inserções desses elementos nos genes e o percentual GC ao redor dessas inserções. Foi possível verificar que as inserções dos elementos P3 e SR2 nas regiões não codificantes desses genes contribuíram para o aumento do tamanho médio dos íntrons em *S. mansoni*. Essas inserções são constituídas por sequências que apresentam comprimento médio de 440bp com conteúdo GC próximo a 50% e correspondem em média a 30% do tamanho das regiões não codificantes. Observando o conteúdo das sequências inseridas e correlacionando-as com um dos estudos descritos na literatura (3), podemos observar que essas sequências, devido ao fato de estarem promovendo o alongamento dos íntrons e estarem inserindo regiões com conteúdo GC mais elevado do que o conteúdo médio do organismo de *S. mansoni*, podem contribuir para a alteração dos padrões de splicing. Também observamos que essas inserções ocorreram preferencialmente distantes dos éxons, o que indica uma possível pressão evolutiva. Especificamente em relação ao elemento SR2, o qual possui três regiões com padrões similares às ilhas CpG, observamos que essas regiões inseriram-se com frequência menor do que seria esperado em simulações realizadas de forma aleatória, indicando uma possível pressão evolutiva contra inserções que podem desencadear processos de silenciamento gênico. Esses resultados corroboram a hipótese de que as inserções dos elementos P3 e SR2 possuem características que podem promover alterações funcionais (conteúdo das sequências inseridas) e estruturais (aumento das regiões não codificantes) dos genes, bem como fatores para atuar sobre elementos epigenéticos (conteúdo GC das inserções) contribuindo de forma significativa para a diferenciação entre os organismos *S. mansoni* e *S. japonicum*.

Palavras-chave: *Schistosoma*. Transposons. Bioinformática.

Referências:

- 1 FESCHOTTE, C. Transposable elements and the evolution of regulatory networks. **Nature Review Genetics**, v. 9, n. 5, p. 397-405, May 2008. .
- 2 VENANCIO, T. M. et al. Bursts of transposition from non-long terminal repeat retro-transposon families of the RTE clade in *Schistosoma mansoni*. **International Journal for Parasitology**, v. 40, n. 6, p. 743-749, May 2010.
- 3 AMIT, M. et al. Differential GC content between exons and introns establishes distinct strategies of splice-site recognition. **Cell Reports**, v. 1, n. 5, p. 543-556, 31 May 2012.

PG79**Caracterização de redes células neuronais na dinâmica de redes complexas**

JACQUES, Osvaldo Vargas¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

ojacques@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nesta proposta, usaremos uma abordagem de percolação para caracterizar a relação entre a dinâmica da morfologia e conectividade em redes utilizando células naturais e artificiais de neurônios no espaço 3D. Os dados de células naturais encontram-se disponível na base neuromorpho (1) e as células artificiais foram geradas e o resultado do experimento publicado em (2), usando medidas possíveis no espaço de medidas neuronais. Conforme a necessidade, mais células artificiais tridimensionais poderão ser geradas. Utilizando a dinâmica de redes complexas, através da simulação do crescimento e formação de redes neuronais em uma determinada região e da aplicação do modelo integra e dispara, pretendemos encontrar características que identificam os diferentes classificações de neurônios (classe, região, espécie) tanto naturais como artificiais. Buscamos responder principalmente que classes de neurônios percolam mais rapidamente e a razão disso. Ainda, queremos entender por que a natureza utiliza somente alguns modelos do espaço neuromorfológico, em detrimento de outros modelos.

Palavras-chave: Neurônios. Redes complexas. Percolação.

Referências:

1 ASCOLI, G. A. ; KRICHMAR, J. L. NeuroMorpho.org: a central resource for neuronal morphologies. **Journal of Neuroscience**, v. 27, n. 35, p. 9247-9251, 2007.

2 COSTA, L. da F. ; ZAWADISKI, K.; MIAZAKI, M.; VIANA, M. P.; TARASKIN, S. Unveiling the neuromorphological space. **Frontiers in Computational Neuroscience**, v .71, 2010. DOI: 10.3389/fncom.2010.00150.

PG80

Sinterização a laser e caracterização dielétrica de cerâmicas de $CaCu_3Ti_4O_{12}$

JESUS, Lílían Menezes¹; M'PEKO, Jean Claude¹; SILVA, Ronaldo Santos²

lilianmfisica@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de Sergipe - UFS

Estudos estruturais com o $CaCu_3Ti_4O_{12}$ (CCTO) são feitos desde os anos 1970 (1); contudo, investigações acerca de suas propriedades elétricas somente se iniciaram recentemente. Em 2000, Subramanian e colaboradores (2) reportaram uma alta permissividade (ϵ) de ~ 12000 (a 1 kHz) em cerâmicas deste material, permanecendo ϵ constante da temperatura ambiente a $\sim 200^\circ C$. Existe na literatura uma controvérsia na hora de explicar a observação de valores de ϵ tão altos neste material, apesar de não ser ferroelétrico. Constantes dielétricas altas permitem menores componentes capacitivos, oferecendo a oportunidade de diminuir o tamanho de dispositivos eletrônicos. Desta forma, o CCTO tem atraído muito o interesse de pesquisadores, tanto do ponto de vista tecnológico quanto científico. Um dos principais problemas que limitam sua imediata aplicação como dielétrico em capacitores cerâmicos é a sua alta perda dielétrica ($\sim 0,15$) próximo à temperatura ambiente. (3) Este material tem sido preparado por diversos pesquisadores usando, principalmente, o método convencional da reação de estado sólido, no intervalo de temperatura de $1000^\circ C$ a $1100^\circ C$, com tratamentos térmicos de até 48 h [2]. Em vários casos, relata-se a formação de fases secundárias tanto no pó calcinado quanto nas cerâmicas sinterizadas. Desta forma, outros métodos de síntese vêm sendo testados nos últimos anos. Neste trabalho, a síntese do CCTO foi realizada por uma rota baseada no método Pechini, seguido de sinterização usando um laser de CO_2 como principal fonte de aquecimento. Após o processamento, as propriedades dielétricas destas cerâmicas foram estudadas e analisadas em termos da influência do processo de sinterização, bem como dos mecanismos físicos envolvidos. As cerâmicas sinterizadas a laser apresentaram alta densidade relativa ($95 \pm 1\%$), com microestrutura homogênea, constante dielétrica em torno de 2000 e baixa perda dielétrica ($\sim 0,06$) a 1 kHz, quando sinterizadas a $1,3 W/mm^2$. O valor de perda dielétrica obtida neste trabalho está entre os mais baixos já registrados. Baseando-se nos resultados obtidos, sugere-se que a sinterização a laser pode ser uma importante ferramenta para a otimização das propriedades dielétricas de cerâmicas de CCTO e, consequentemente, futuras aplicações na indústria de capacitores e dispositivos eletrônicos, cujo consumo mundial é cada vez maior.

Palavras-chave: CCTO. Alta constante dielétrica. Sinterização a laser.

Referências:

- 1 BOCHU, B.; DESCHIZEAUX, M.N.; JOUBERT, J.C.; COLLOMB, A.; CHENAVAS, J.; MAREZIO, M. Synthesis and characterization of series of isotype perovskite titanates of $[CaCu_3](Mn_4)O_{12}$. **Journal of Solid State Chemistry**, v. 29, n.2, p 291-298, 1979.
- 2 SUBRAMANIAN, M. A.; LI, D.; DUAN, N.; REISNER, B. A.; SLEIGHT, A. W. High dielectric constant in $ACu_3Ti_4O_{12}$ and $ACu_3Ti_3FeO_{12}$ phases. **Journal of Solid State Chemistry**, v. 151, p. 323-325, 2000. DOI: 10.1006/jssc.2000.8703. .

3 KOBAYASHI, W.; TERASAKI, I. $CaCu_3Ti_4O_{12}/CaTiO_3$ composite dielectrics: Ba/Pb-free dielectric with high dielectric constants. **Applied Physics Letters**, v. 87, p. 032902, 2005. DOI:10.1063/1.1997278.

PG81

O expoente de Lyapunov: a teoria de caos aplicada na criptografia

Lyapunov exponent: chaos theory applied to cryptography

JUSTO, Marina Jeaneth Machicao¹; MARTINEZ, Odemir Bruno¹

mj.machicao@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Na teoria de caos, a estabilidade dos sistemas dinâmicos é avaliada calculando o bem conhecido "Expoente de Lyapunov" (LE). O LE quantifica o comportamento do sistema quando evolvido a partir de duas condições iniciais muito próximas. (1) Por tanto, o LE pode determinar se um sistema dinâmico é caótico ou não. Levando em consideração que a estabilidade dos sistemas dinâmicos é geralmente reconhecida como a principal característica, pois dá uma visão da natureza intrínseca do sistema. (1) Na criptografia, um modo de operação é uma técnica que melhora o efeito de um cifrador de bloco. No ano 2001 o National Institute of Standards and Technology (NIST) estandardizou cinco modos de operação: ECBC, CBC, OFB, CFB e CTR. Lamentavelmente, temos identificado algumas questões que não foram discutidas na literatura pública da criptografia: "como qualitativamente medir entre modos de operação?" Para superar esta questão desafiadora fomos motivados pelas analogias entre os sistemas dinâmicos e criptográficos, por um lado, e a carência de uma metodologia para discriminar entre os diferentes modos de operação, por outro lado. Nós propomos uma metodologia baseada no ponto de vista do LE para comparar entre os cinco modos de operação antes mencionados. Finalmente, gostaríamos de saber se os cinco modos de operação divergem, e se eles fizerem determinar qual é o melhor. Embora o processo de criptografia de cifrar e decifrar informações não constitui um sistema dinâmico e tal, tem sido relatado em vários trabalhos que são possíveis traçar analogias paralelas entre os sistemas de criptografia e sistemas dinâmicos. (2-3) Assim, ao estabelecer tais lineamentos, temos um meio para explorar as ferramentas similares, como os que foram concebidos no contexto de sistemas dinâmicos, a fim de caracterizar os sistemas criptográficos, isto é, os modos de operação. Descobrimos que a lista de classificação dos modos de operação do NIST por ordem de qualidade é: CTR, CBC, CFB, OFB e do ECB (em ordem decrescente). Os resultados mostraram o nosso método como uma ferramenta eficaz para classificar qualitativamente os modos de operação. Demonstramos neste artigo que o LE pode ser aplicado para resolver o último problema. Nós mostramos como estas medidas podem ser exploradas para identificar o modo de operação que foi usado durante o processo de cifrado. A aplicação do expoente de Lyapunov para os modos de operação, efetivamente, podem comparar eles de uma maneira qualitativa. Estes resultados mostraram um avanço importante para a criptografia, porque nunca foi apresentada uma pesquisa de comparação qualitativa na literatura pública. Além disso, esta classificação permitiria aos usuários da criptografia para escolher entre os modos de operação. Mais em particular, poder-se-ia detectar possíveis vulnerabilidades de cifras, já que a qualidade depende de valorações e classificações numéricas. Finalmente nossos resultados mostram ao LE como uma ferramenta potencial na criptoanálise.

Palavras-chave: Expoente de Lyapunov. Criptografia. Modos de operação.

Classically in chaos theory, the stability of a dynamical system is assessed by computing its so-called largest Lyapunov exponent (LE) that quantifies how it behaves if it is evolved from two different but close initial conditions (1), therefore the LE can determine whether a dynamical system is chaotic or not. Taking into account that the stability of a dynamical system is generally acknowledged as its main characteristic because it gives insight into its intrinsic nature. (1) In Cryptography, a mode of operation is a technique to improve a block cipher effect. In 2001 the National Institute of Standards and Technology (NIST) standardized five modes of operation: ECB, CBC, OFB, CFB and CTR. Unfortunately, we identify some issues that have not been discussed in cryptography public literature: "how to qualitatively measure among block cipher modes of operation?" To overcome this challenge question we were motivated by the analogies between dynamical and cryptographic systems, on the one hand, and the lack of a means to discriminate between different modes of operation on the other hand. We propose a methodology based on the LE viewpoint to compare among the five modes of operation, before mentioned. Finally, we would like to know whether the five modes of operation diverge, and, if they do, which one is the best. Although the cryptographic process of encrypting and decrypting information does not constitute a dynamical system and such, it has been reported in several papers that it is possible to draw parallels between cryptographic and dynamical systems. (2-3) Hence, upon drawing such parallels, we have a means to exploit similar tools as the ones that have been conceived in the framework of dynamical systems in order to characterize cryptographic systems. We found that the rank list in order of quality is: CTR, CBC, CFB, OFB and ECB (in descending order) for the NIST block cipher modes of operation. This results showed our method to be an effectively tool to qualitatively rank modes of operation. We demonstrate in this paper how LE can be relied upon for tackling the latter problem. We show how these measures can be exploited to identify the mode of operation that was used during the encryption process. The application of Lyapunov Exponent to cryptography modes of operation, effectively, can compare in a qualitative manner. These results show an important advance to cryptography, because it has never been reported a qualitative comparison research in public literature. Moreover, this ranking would allow cryptography users to choose among modes of operation. More in particular, it could detect possible vulnerabilities of ciphers, since quality depends on ranking and numerical ratings. Finally its results showed the LE as a potential tool in cryptanalysis.

Keywords: Lyapunov exponent. Mode of operation. Cryptography.

Referências:

- 1 ECKMANN, J.P. Ergodic theory of chaos and strange attractors. **Reviews of Modern Physics**, v. 57, n. 3, part 1, p. 617-656, 1985.
- 2 AMIGÓ, J. M.; KOCAREV, L.; SZCZEPANSKI, J. Discrete Lyapunov exponent and resistance to differential cryptanalysis. **IEEE Transactions on Circuits and Systems II: express briefs**, v. 54, n.10, p. 82-886, Oct. 2007.
- 3 JAKIMOSKI, G.; SUBBALAKSHMI, K. P. Discrete Lyapunov exponent and differential cryptanalysis. **IEEE Transactions on Circuits and Systems II: express briefs**, v. 54, n. 6, p. 499-501, June 2007.

PG82

Sistema para estudar anisotropias em interações entre átomos de Rydberg ultra-frios

A system to study anisotropy in interactions between cold Rydberg atoms

KONDO, Jorge Douglas Massayuki¹; GONÇALVES, Luis Felipe¹; CABRAL, Jader¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹
massayuki.kondo@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A compreensão da interação entre átomos de Rydberg ultra-frios tem importância fundamental em experimentos de computação quântica utilizando átomos neutros. Campos elétricos residuais são comuns em diferentes tipos de armadilhas atômicas e pode levar a decoerências (1) e anisotropias. Recentemente, nosso grupo tem construído um novo sistema para estudar as interações entre átomos de Rydberg utilizando uma armadilha óptica (dipole trap) do tipo QUEST (Quasi electrostatic trap) para confinar átomos neutros de Rubídio. Os átomos de Rydberg são excitados a partir do estado 5P utilizando um sistema SHG (Second Harmonic Generation) contínuo na região de 480nm. Um elaborado sistema de placas metálicas e barras permite o controle fino da intensidade e direção do campo elétrico na região da armadilha, o que nos permite definir o eixo de quantização para colisões. Nosso objetivo é estudar anisotropias nas colisões $nD+nD$ em função do ângulo entre o campo elétrico e o eixo colisional.

Palavras-chave: Átomos de Rydberg. Armadilhas ópticas. Simulação quântica.

The comprehension of interactions between cold Rydberg atoms plays an important role on quantum computing experiments using such atoms. Stray electrical fields are common in different types of atomic traps, and may lead to decoherences (1) and anisotropies due to the applied direction of electric field. Recently, our group has built a new setup to study Rydberg interactions using a QUEST optical dipole trap to confine neutral rubidium atoms. The Rydberg atoms are excited from the 5P state using a CW homemade second harmonic generation system at 480 nm. An elaborated system of metallic plates and bars allow us to control very well the value and direction of an external electric field at atomic trap, which allows us to define a quantization axis for the collisions. Our goal is to study the anisotropy of $nD+nD$ collisions in this system as a function of the angle between the electric field and the collisional axis.

Keywords: Rydberg atoms. Dipole trap QUEST. Quantum simulation.

Referências:

1 CABRAL, J. S.; KONDO J. M.; GONÇALVES, L. F.; NASCIMENTO, V. A.; MARCASSA, L. G.; BOOTH, D.; TALLANT, J.; SCHWETTMANN, A.; OVERSTREET, K. R.; SEDLACEK, J.; SHAFFER, J. P. Effects of electric fields on ultracold Rydberg atom interactions. **Journal of Physics B**, v. 44, n. 18, p. 184007-1-184007-12, 2011.

PG83

Caracterização estrutural e funcional da galectina 4 humana e seus domínios de reconhecimento de carboidratos

KUMAGAI, Patricia Suemy¹; DYSZY, Fábio Henrique¹; BARUFFI, Marcelo Dias²; NONATO, Maria Cristina²; COSTA FILHO, Antonio José da³
patriciasuemy@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto - USP

³Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

As galectinas pertencem à família das lectinas e são caracterizadas por possuir afinidade específica por beta galactosídeos e conter domínios de reconhecimento de carboidratos (CRDs) homólogos. Estas se encontram amplamente distribuídas em células normais e neoplásicas de diferentes organismos e estão envolvidas em uma grande diversidade de mecanismos celulares tal como interações com diferentes carboidratos, adesão celular e apoptose.(1) A disfunção das galectinas pode estar associada com progressão tumoral e carcinomas em humanos, o que as torna uma ferramenta muito promissora no diagnóstico ou tratamento de câncer. A galectina 4 humana (HGal4) é um monômero de 36 kDa composta por dois domínios de reconhecimento de carboidratos (CRD1 e CRD2) conectados por um peptídeo de ligação. Os mecanismos de interação em que a HGal4 está envolvida geralmente requer reconhecimento de carboidratos na superfície celular. No entanto, os detalhes específicos sobre esses mecanismos, os determinantes moleculares de interação e a especificidade distintas de cada domínio, bem como da HGal4, permanecem desconhecidas. Neste trabalho, realizamos análises espectroscópicas dos domínios separadamente e da HGal 4 íntegra considerando a especificidade de carboidratos diferentes e a relevância do peptídeo de ligação. Os domínios e a proteína íntegra foram expressos e purificados usando protocolos previamente descritos.(2) A espectroscopia de Dicroísmo Circular foi usada para monitorar a estabilidade térmica de cada domínio na ausência e na presença de diversos carboidratos. Os espectros de CD indicam que a presença de carboidrato não altera a estrutura da proteína, contudo aumenta a estabilidade térmica dos mesmos. Estes resultados sugerem que cada domínio responde diferentemente à cada açúcar e, conseqüentemente, suas especificidades devem ser diferentes. Além disso, o CRD2 pode ser o domínio que coordena a ligação da HGal4 e o peptídeo de ligação deve possuir algum papel específico nestes mecanismos.

Palavras-chave: Galectina 4. CRD. CD.

Referências:

- 1 DRICKAMER, K.; TAYLOR, M. E. . Biology of animal lectins. **Annual Review of Cell Biology**, v.9, p.237-264, 1993.
- 2 ZIMBARDI, A. L. L. R.; DIAS-BARUFFI, M.; NONATO, M. C. Cloning, expression, purification, crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of the N-terminal carbohydrate-recognition domain of human galectin-4. **Acta Crystallographica F**, v.66, n.5, p. 542-545, 2010.

PG84

Filtro de Kalman não linear com redes neurais embarcado em uma arquitetura reconfigurável baseada em FPGA para uso dedicado em projeções tomográficas de raios X para ensaios da física de solos

LAIA, Marcos Antonio de Matos¹; CRUVINEL, Paulo Estevão²

marcoslaia@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação São Carlos

Estudar as propriedades físicas do solo envolve conhecer a umidade, o transporte de água e solutos, a densidade, a identificação da porosidade, o que é essencial para o crescimento de raízes das plantas. Para esses estudos, a tomografia de raios X tem se mostrado uma técnica útil. (1) As imagens tomográficas são obtidas através de projeções (sinais) que são reconstruídos com algoritmos adequados. No processo de aquisição dessas projeções, podem surgir ruídos provenientes de diferentes fontes. O sinal tomográfico apresenta ruídos que possuem uma distribuição de Poisson gerada pela contagem de fótons, bem como o detector de fótons é influenciado por uma presença de ruído eletrônico com uma distribuição Gaussiana. Essas diferentes distribuições podem ser mapeadas com transformadas não lineares específicas que alteram uma distribuição Gaussiana para outros tipos de distribuições, como a de transformada de Anscombe (Poisson) ou transformada de Box-Muller (Uniforme), mas são aproximações que apresentam erros acumulativos. As transformadas podem ser então mapeadas por um sistema de redes neurais, o que garante um melhor resultado com o filtro de Kalman não linear em que os pesos da rede e as medidas das projeções são estimados em conjunto. (2) Este trabalho apresenta uma nova solução com o filtro de Kalman descentralizado utilizando redes neurais artificiais embarcado em uma arquitetura reconfigurável baseada em FPGA com o intuito de se obter um valor ótimo de melhoria na relação Sinal/Ruído de projeções tomográficas e consequentemente nas imagens reconstruídas fazendo melhorias no método de análise dos físicos na ciência dos solos. (3)

Palavras-chave: Computação reconfigurável. Filtro de Kalman. Tomografia.

Referências:

- 1 LAIA, M. A. M.; CRUVINEL, P. E. An application approach to Kalman filter and CT scanners for soil science. In: GUNGOR, B. O. (Ed.) **Principles, application and assessment in soil science**.Disponível em:<<http://intechopen.com/articles/show/title/an-application-approach-to-kalman-filter-and-ct-scanners-for-soil-science>>.Acesso em: 02 ago.2012. .
- 2 LAIA, M. A. M.; CRUVINEL, P. E. Evaluation of an embedded unscented Kalman filter for soil tomography. In: BRAZILIAN CONFERENCE ON CRITICAL EMBEDDED SYSTEMS,2011, São Carlos.**Proceedings...**São Carlos: USP, 2011. v. 1 .
- 3 LAIA, M. A. M.; CRUVINEL, P. E. Using simulink to generate HDL code for validating an embedded Kalman filter. BRAZILIAN CONFERENCE ON CRITICAL EMBEDDED SYSTEMS,2,2012, São Carlos. **Proceedings...** São Carlos : USP, 2012. v. 2.

PG85

Desenvolvimento de modelos e sistemas ópticos para otimização sistêmica em retinografia

LENCIONE, Diego¹; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹

diego.lencione@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Construir um equipamento capaz de obter imagens da retina humana com alto desempenho, e que atenda as necessidades de médicos oftalmologistas especializados no diagnóstico de doenças que acometem este tecido, é um desafio que para ser superado exige a dedicação de uma equipe atuante em diversas áreas do conhecimento. Tal multidisciplinaridade é indiscutível quando são observados os sistemas ópticos, eletrônicos e mecânicos, os softwares e até mesmo o design e a pesquisa de mercado, que são todos componentes do produto final e elementos necessários para o seu sucesso. Contudo, o propósito fundamental deste equipamento é inegavelmente óptico: em todos os exames realizados, a retina é iluminada homogeneamente em uma certa região do espectro e uma imagem deste tecido é captada por meio de fenômenos de reflexão/espalhamento, de fluorescência e até mesmo de auto-fluorescência. Desta forma, o principal intento deste trabalho é demonstrar como a utilização de modelos radiométricos e de simulações ópticas são úteis não somente para a obtenção de um sistema óptico robusto e eficiente, mas que também podem contribuir com a geração de ferramentas para se atingir uma melhor configuração de todo o equipamento. Neste sentido, foram desenvolvidos dois modelos principais: o primeiro para prever o sinal elétrico e a relação sinal-ruído nos elementos sensíveis do sensor de imagem como função de parâmetros conhecidos do equipamento, e o segundo que apresenta limites para a resolução efetiva das imagens em virtude do limite imposto pela difração da luz. Ambos são visualizados de maneira gráfica e auxiliam na determinação de variáveis e na escolha de dispositivos fundamentais do produto. Mais especificamente ao projeto do sistema óptico, chama a atenção o número reduzido de publicações a este respeito, apesar da atração deste tema por empresas conceituadas na área de oftalmologia por muitos anos. Existe um número imenso de patentes, muitas ininteligíveis, onde é claro que os grandes desafios, quando superados, se tornaram segredos industriais. (1) Neste trabalho, serão apresentados os resultados obtidos quanto: ao emprego de LEDs como fontes de luz para o sistema de iluminação; a técnica utilizada para eliminação dos reflexos oriundos de todas as interfaces ópticas do conjunto comum ao sistema de iluminação e imageamento da retina, baseada no princípio de inserção de pequenos pontos absorvedores de luz; o espectro de acromatização desde 463nm até 780nm; a compensação das aberrações ópticas médias introduzidas pelo olho humano (2); as limitações impostas pelos fenômenos de auto-fluorescência da córnea e do cristalino na região azul do espectro, associados ao envelhecimento e a presença de catarata (3); o intervalo de ajuste de dioptrias, entre +12D e -12D para o conjunto de imageamento da retina; as análises de desempenho óptico sequenciais e não sequencias que, somadas com as análises de tolerância, conseguem prever com grande precisão o desempenho dos conjuntos fabricados e montados. Por fim, serão apresentados os resultados e as imagens obtidas com os primeiros protótipos e com o produto final, que atendeu às normas reguladoras, e que já possui unidades funcionais operando em clínicas especializadas.

Palavras-chave: Modelos radiométricos. Simulações ópticas. Retinografia.

Referências:

- 1 DEHOOG, E.; SCHWIEGERLING, J. Optimal parameters for retinal illumination and imaging in fundus cameras. **Applied Optics**, v. 47, n. 36, p. 6769-6777, Dec. 2008.
- 2 ESCUDERO-SANZ, I.; NAVARRO, R. Off-axis aberrations of a wide-angle schematic eye model. **Journal Optical Society of America**, v. 16, n. 8, p. 1881-1891, Aug. 1999.
- 3 ROVATI, L.; DOCCHIO, F. Autofluorescence methods in ophthalmology. **Journal of Biomedical Optics**, v. 9, n.1, p. 9-21, Jan/Feb. 2004.

PG86

Estudo estrutural de proteínas da família Hidrolases de Glicosídeos 5

LIBERATO, Marcelo Vizoná¹; POLIKARPOV, Igor¹

mvliberato@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A lignocelulose de biomassa, como o bagaço cana-de-açúcar, é uma grande promessa de produção de bioenergia de baixo impacto ambiental no Brasil. Entretanto, a hidrólise enzimática, considerada como método para a sacarificação da biomassa, é impedida pela dificuldade de controle do processo. Para que esta tecnologia se torne sustentável e de baixo custo, devemos compreender melhor o processo hidrolítico da celulose. (1) As endoglucanases, grupo de enzimas essenciais para a hidrólise da celulose, estão distribuídas em 16 das 118 famílias de hidrolases de glicosídeos. A família 5 das hidrolases de glicosídeos (GH5) é uma família muito divergente em termos de função com um alto número de membros, incluindo mais de 240 endoglucanases diferentes (CAZy). Os membros desta família possuem uma baixa identidade em suas sequências, e apenas oito aminoácidos são conservados. (2) Baseando-se na análise de cluster hidrofóbico, a família GH5 é classificada no Clan A das hidrolases de glicosídeos, que também são conhecidas como Superfamília 4-7, com um enovelamento (a-b)₈ do domínio catalítico. As enzimas GH5 clivam ligações glicosídicas por um mecanismo de retenção envolvendo uma hidrólise ácido-base em que dois resíduos conservados (geralmente glutamatos), localizados na porção carboxiterminal das fitas-B 4 e 7, catalizam a reação. De acordo com a alta variabilidade da família GH5 e por ter sido pouco estudada até então, o presente trabalho teve como objetivo expressar, purificar e cristalizar enzimas desta família. Foram selecionadas 9 enzimas da família GH5 de organismos disponíveis. Dentre elas, 6 foram expressas na forma solúvel e purificadas. E uma delas, uma GH5 de *Bacillus licheniformis* (GH5bl), foi cristalizada e teve sua estrutura resolvida a 3,1 Å de resolução. A GH5bl foi cristalizada na sua forma completa, ou seja, contendo o domínio catalítico e o domínio de ligação ao carboidrato (CBM), tornando-a uma importante estrutura levando em conta que muito poucas estruturas cristalográficas foram determinadas de enzimas contendo os dois domínios.

Palavras-chave: Biomassa. Endoglucanase. Cristalização.

Referências:

- 1 WYMAN, C. E. Biomass ethanol: technical progress, opportunities and commercial challenges. **Annual Review of Energy Environment**, v. 24, p. 189-226, 1999. DOI: 10.1146/annurev.energy.24.1.189.
- 2 WANG, Q. P. et al. Glu280 is the nucleophile in the active-site of *Clostridium thermocellum* CelC, a family-A endo-beta-1,4-glucanases. **Journal of Biological Chemistry**, v. 268, n. 19, p. 14096-14102, 1993.

PG87

Aspectos termodinâmicos da gravitação semiclássica

LIMA, Cesar Augustus Uliana Lima¹; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla¹

uliana@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos desenvolvimentos mais surpreendentes da relatividade geral na década de 70 foi a descoberta que os buracos negros são objetos termodinâmico (1), isto é, obedecem as três leis da termodinâmica. Posteriormente foi sugerido (2) que a relatividade geral em si é uma teoria termodinâmica e que assumindo a validade da 1ª lei e a proporcionalidade da entropia e da área poderíamos derivar as equações de Einstein. Essa abordagem tem o inconveniente de conter muitas suposições cuja validade física é questionável além de carecer de uma demonstração matemática clara. Nesse trabalho, de modo mais modesto, provamos que supondo os buracos negros serem objetos termodinâmicos e deixando livre a dinâmica do campo gravitacional segue que as equações de Einstein são uma consequência da 1ª lei da termodinâmica. No caso dos buracos negros podemos validar todas as suposições física e fornecer uma demonstração matemática transparente, de modo que fica evidente que para buracos negros é equivalente supor as equações de campo ou a termodinâmica.

Palavras-chave: Relatividade. Termodinâmica. Buracos negros.

Referências:

1 WALD, R. M. **General relativity**. Chicago: Chicago University Press, 1984.

2 JACOBSON, T. Thermodynamics of spacetime: the Einstein equation of state. **Physical Review Letters**, v. 75, n. 7, p. 1260-1263, 1995.

PG88

ViTaMIn - visual table modeller interface: uma nova ferramenta para construção, análise e validação de modelos comparativos de proteínas

LIMA, Gustavo Machado Álvares¹; GUIDO, Rafael Victório Carvalho¹

gustavo.alvares.lima@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A semelhança estrutural entre proteínas homólogas pode ser utilizada para a modelagem de proteínas para as quais a estrutura 3D ainda não foi determinada experimentalmente. A criação de modelos 3D utiliza software específico sendo o programa Modeller (baseado em linguagem Python) um dos mais populares. Entretanto, sua aplicação é limitada aos usuários mais experientes, familiarizados com a utilização de linhas de programação inseridas em terminal de comando dos sistemas operacionais. Tendo em vista a ampliação e popularização desse método extremamente importante para a elucidação de novos alvos moleculares atrativos para a descoberta de novas moléculas bioativas, uma ferramenta computacional robusta, eficaz e, principalmente, "amigável" foi desenvolvida para o programa Modeller. (1) ViTaMIn (Visual Table Modeller Interface) possui como principal característica a praticidade de se trabalhar em ambiente gráfico aliado a capacidade de personalização de comandos no terminal. A utilização do ViTaMIn auxiliou significativamente a construção de modelos 3D de dois alvos atrativos (e.g., fosfopanteteinil transferase - PPT e benzoato CoA ligase - BCL) para o desenvolvimento de novos agroquímicos para a cultura de cana-de-açúcar. A interface ViTaMIn possui um criador rápido e robusto de modelos para usuários iniciantes, com linhas de comandos pré-configuradas para facilitar e otimizar as etapas de modelagem. Os protocolos pré-ajustados permitem que modelos 3D sejam construídos rapidamente, fornecendo ao pesquisador subsídios para a seleção do modelo mais adequado. Recursos mais complexos podem ser inseridos através de scripts no ViTaMIn, possibilitando que usuários experientes não encontrem limitações comuns em ambientes gráficos. As etapas de avaliação e validação de modelos são auxiliadas pela possibilidade de criação e visualização de gráficos de energias DOPE e diagrama de Ramachandran. ViTaMIn está integrado ao software PyMOL para visualização e edição dos modelos em tempo real. A aplicação do ViTaMIn para a modelagem das enzimas BCL e PPT (proteínas moldes: 2V7B e 2CG5, respectivamente) mostrou-se robusta e eficaz. No total, 200 modelos foram construídos e avaliados utilizando-se ViTaMIn e o programa Modeller 9.10. A análise do modelo da BCL indica uma significativa conservação de resíduos próximos ao sítio catalítico, enquanto o modelo da PPT sugere a presença de mutações conservativas. Estes resultados auxiliarão os estudos de planejamento de moléculas bioativas como candidatas a novos agentes agroquímicos. ViTaMIn é uma ferramenta inovadora e útil para pesquisadores iniciantes e avançados na modelagem de proteínas. A interface ViTaMIn auxiliou significativamente tanto na produção de modelos moleculares quanto no processo de validação, mostrando-se sólida e robusta.

Palavras-chave: Modelagem. Proteína. Química medicinal.

Referências:

1 ESWAR, N. Comparative protein structure modeling with MODELLER. **Current Protocols in Bioinformatics**, 2007. DOI: 10.1002/0471140864.ps0209s50.

PG89

Avaliação e caracterização de potenciais substratos para produção do etanol de segunda-geração

LIMA, Marisa Aparecida de¹; GOMEZ, Leonardo²; McQUEEN-MASON, Simon²; POLIKARPOV, Igor¹

marisalima@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²University of York, York - UK

O crescimento acentuado da população nas últimas décadas, juntamente com o aumento da demanda por energia, a instabilidade nos preços do petróleo, as perspectivas de esgotamento das reservas, além de compromissos mais sólidos com a questão ambiental fizeram renascer a atenção e a busca por fontes alternativas de energia.(1) Neste contexto, a produção de etanol lignocelulósico emerge como um paradigma mundial, aproveitando os resíduos agroindustriais, da indústria de celulose e papel, entre outros setores.(2) No Brasil, o emprego do bagaço de cana-de-açúcar, resíduo da primeira geração de etanol, tem se mostrado a alternativa mais promissora, e por isso, principal objeto de pesquisa nessa área. Entretanto, apesar da grande abundância do bagaço, existem outros resíduos que merecem a atenção dos pesquisadores, entre eles cascas de eucalipto e vários tipos de gramíneas. No presente trabalho, 6 diferentes tipos de biomassas brasileiras (bagaço de cana-de-açúcar, cascas de dois clones comerciais de eucalypto, capim elefante, mombassa e marandú) foram analisados quanto ao seu potencial para produção de etanol lignocelulósico. Essas biomassas foram submetidas a diferentes estratégias de pré-tratamento, como ácido, alcalino, bissulfito de sódio, explosão de vapor, em diferentes temperaturas, objetivando uma maior eficiência durante a etapa de hidrólise enzimática e liberação dos açúcares fermentescíveis. Foram testadas e estabelecidas diferentes metodologias para caracterização das biomassas antes e após tratamento, entre elas: análises de composição química, FTIR, RMN, DRX, MEV, determinação de porosidade por adsorção de nitrogênio (B.E.T), bem como análises para determinação da eficiência de hidrólise e conversão total da celulose.

Palavras-chave: Etanol lignocelulósico. Biomassas brasileiras. Caracterização química e física.

Referências:

1 MOSIER, N. et al. Features of promising technologies for pretreatment of lignocellulosic biomass. **Bioresource Technology**, v. 96, n. 6, p. 673-686, 2005.

2 HENDRIKS, A. T. W. M.; ZEEMAN, G. Pretreatments to enhance the digestibility of lignocellulosic biomass. **Bioresource Technology**, v. 100, n. 1, p. 10-18, 2009.

PG90

Novidades em teorias de calibre e solitons Novelties in gauge theories and solitons

LUCHINI, Gabriel¹; FERREIRA, Luiz Agostinho¹; ZAKRZEWSKI, Wojtek²

gabriel.luchini@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Durham University

Parte 1. Apesar de a formulação integral da eletrodinâmica clássica ser conhecida, o mesmo não é verdade para as teorias de gauge não abelianas, base do Modelo Padrão das interações fundamentais da Natureza. Apresentamos aqui uma versão integral das equações de Yang-Mills, e a solução para o antigo problema de como definir e calcular cargas conservadas que sejam invariantes por transformações gerais de calibre. (1) Consideramos o cálculo dessas cargas para soluções de instantons, merons, dyons e monopólos. (2) Em muitos casos a nossa formulação leva naturalmente à quantização das mesmas. Os resultados são importantes para o entendimento de aspectos globais de teorias de calibre não-abelianas. Parte 2. A equação de Schrodinger não-linear é muito importante em diferentes áreas da física e dominante em fibra ótica. Sendo uma equação integrável seu tratamento matemático é bastante rico. Consideramos modificações dessa equação que levam a uma teoria não-integrável mas que possui uma propriedade intrigante: a existência de quantidades que são conservadas assintoticamente no tempo. (3) Por exemplo, no caso da solução de dois sólitons essas quantidades tem seus valores alterados durante o processo de espalhamento, mas retornam ao valor inicial quando os sólitons estão afastados após a colisão. Esses resultados (analíticos e numéricos) não só tornaram mais robustos os métodos matemáticos para tratar teorias "quasi-integráveis" mas também se mostram bastante promissores para aplicações. A abordagem possibilita o tratamento matemático de teorias não lineares e não integráveis, e portanto, com grande potencial para aplicações fenômenos reais.

Palavras-chave: Teorias de calibre não-abelianas. Solitons. Quasi-integrabilidade.

Part 1. Although the integral formulation of classical electrodynamics is well known, the same is not true for the non-abelian gauge theories, which form the basis of the standard model of fundamental interactions of Nature. (1) Here we present (1) an integral version of the Yang-Mills equations and the solution of the old problem of defining conserved charges that are invariant under general gauge transformations. We consider the calculation (2) of these charges for instantons, merons, dyons and monopoles solutions. In many cases our formulation leads naturally to the quantisation of the charge. The results are important for the understanding of global aspects of non-abelian gauge theories. Part 2. The non-linear Schrodinger equation is important in different branches of physics and dominant in optical fiber. As an integrable equation its mathematical treatment is very rich. We consider modifications (3) of this theory leading to a non-integrable model with an intriguing feature: the existence of quantities that are asymptotically conserved in time. For instance, in the case of the two-soliton solution these quantities change their value during the scattering process, but regain the initial value

after the collision. These results (analytical and numerical) not only make the mathematical methods for treating "quasi-integrable" theories more robust but also are very promising for applications. The approach makes possible the mathematical treatment of non-linear and non-integrable theories and therefore with great potential for dealing with real phenomena.

Keywords: Non-abelian gauge theories. Solitons. Quasi-integrability.

Referências:

- 1 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G. Gauge and integrable theories in loop space . **Nuclear Physics B**, v.858, n. 2, p. 336-365, 2012.
- 2 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G. The integral equations of Yang-Mills and its gauge invariant conserved charges. **Physical Review D**, 2012. In Press.
- 3 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G.; ZAKRZEWSKI, W. J. The concept of quasi-integrability for modified non-linear Schrodinger models. **Journal of High Energy Physics**, 2012. In press.

PG91

Estudo teórico e experimental de OFETs usando PMMA e P3HT

Theoretical and experimental study of bottom-gate OFETs using P3HT and PMMA

MACIEL, Alexandre de Castro¹; FARIA, Roberto Mendonça¹

acmaciel@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho apresentamos medidas de caracterização elétrica em OFETs do tipo bottom-gate usando rr-P3HT como semicondutor e PMMA como isolante da porta. A arquitetura do dispositivo desempenha um papel importante na versatilidade do transistor em eletrônica. No caso de dispositivos do tipo bottom-gate permitem modificações de superfície na camada isolante sem dano à camada semicondutora. Foram fabricados transistores com comprimento de canal variando de 50 μm to 200 μm , e razão W/L igual a 20, obtendo-se correntes da ordem de 1 μA e mobilidade de buracos de cerca de $10^{-2} \text{ cm}^2/\text{V.s}$. Com o objetivo de entender os fenômenos físicos responsáveis pelo comportamento elétrico dos transistores, nós apresentamos um modelo baseado em uma generalização do modelo de Vissenberg-Matters. (1) O modelo usa uma solução numérica da equação de Poisson em 2D levando em consideração os potenciais de dreno, fonte e porta como condições de contorno. Por fim, a corrente é calculada usando uma rede de resistores finita.

Palavras-chave: OFET. Polímeros. P3HT e PMMA.

We report p-type bottom-gate organic field effect transistors made of poly(3-hexylthiophene) (P3HT) as channel material and poly(methyl methacrylate) (PMMA) as dielectric layer. The architecture of the device plays an important role on the versatility of transistors in electronics. Bottom-gate transistors, in particular, are well suited for dielectric modification and channel characterization by spectroscopy techniques. Transistors with channel length ranging from 50 μm to 200 μm , and W/L around 20, were produced yielding currents of the order of 1 μA and the hole mobility close to $10^{-2} \text{ cm}^2/\text{V.s}$. As an attempt to understand the physical phenomena responsible for the electrical behavior of OFETs, we developed a model for current in transistors based in a generalization of Vissenberg-Matters model. (1) This model is derived by a Poisson equation that is numerically solved taking into account a two dimensional dependence of the voltage in the channel, due to a superposition of source-drain and gate voltages. Finally, the electric current is calculated in terms of a resistor network.

Keywords: OFET. polymers. P3HT and PMMA.

Referências:

1 VISSENBERG, M.; MATTERS, M. Theory of the field-effect mobility in amorphous organic transistors. **Physical Review B**, v. 57, n. 20, p. 12964-12967, 1998.

PG92

Caracterização de novas substâncias com atividade anti-tumoral

MAGALHÃES, Luma Godoy¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

lumagm@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Mais de cem doenças caracterizadas pelo crescimento e multiplicação desordenado de células atípicas capazes de invadir e migrar (metástase) por diversos tecidos e órgãos são denominadas câncer.(1) Consideradas a sétima maior causa de mortes no mundo (OMS, 2011) possuem como principal causa de morte a metástase, o que torna a migração celular um bom alvo molecular para o desenvolvimento de terapias antitumorais. As abordagens terapêuticas existentes possuem como principal entrave a semelhança entre as células malignas e sadias do organismo, o que leva à alta toxicidade dos tratamentos. O presente projeto de mestrado visa à caracterização de novas moléculas com atividade anticâncer através da triagem de compostos de origem natural e sintética, realizando para tanto ensaios celulares in vitro de inibição da migração celular em células metásticas. As linhagens celulares utilizadas serão a MDA-MB-231 de carcinoma de mama humano e a linhagem DU-145 de carcinoma de próstata humano. Os ensaios realizados serão o ensaio celular wound healing, de caráter semi-quantitativo na determinação da migração celular(2), e o ensaio de invasão e migração celular em câmara de Boyden, que permite avaliação quantitativa da inibição de migração e invasão celular e a determinação de parâmetros biológicos associados aos compostos.(3)

Palavras-chave: Câncer. Ensaios celulares. Fármacos.

Referências:

- 1 ALTEI, W. F. **Triagem biológica, identificação e planejamento de novos candidatos a agentes anticâncer a partir de produtos naturais e compostos sintéticos.** 2012. Trabalho de Qualificação (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.
- 2 YUE, P. Y. K. et al . A simplified method for quantifying cell migration/wound Healing in 96-well plates. **Journal of Biomolecular Screening**, v.15, n. 4, p. 427-433, 2010.
- 3 ALBINI, A.; IWAMOTO, Y.; KEINMAN, H. K.; MARTIN, G. R.; AARONSON, S. A.; KOZLOWSKI, J. M.; MCEWAN, R. N. A rapid in vitro assay for quantitating the invasive potential of tumor cells. **Cancer Research**, v. 47, n. 12, p. 3239-3245, 1987.

PG93

Heme oxigenase de *Plasmodium falciparum*: estudos de biologia molecular estrutural

MALUF, Fernando Vasconcelos¹; GARCIA, Célia Regina da Silva²; OLIVA, Glaucius¹; GUIDO, Rafael Victório Carvalho¹
fernandovmaluf@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Biociências - USP

A malária, uma doença parasitária negligenciada, é responsável pela morte de 2 milhões de indivíduos anualmente, sendo suas vítimas concentradas nos países pobres e subdesenvolvidos. (1) Essa situação preocupante tem sido agravada pelo surgimento de cepas resistentes aos fármacos disponíveis para o controle e tratamento da doença. Desta maneira, torna-se de extrema importância o entendimento da bioquímica e dos mecanismos moleculares do parasita, podendo estes ser explorados como alvos para o planejamento de quimioterápicos inovadores. Recentemente, demonstrou-se que o *Plasmodium falciparum* - agente etiológico da forma mais grave de malária - possui um gene para codificar a enzima heme oxigenase (PfHO). (2) Esta enzima catalisa a conversão do grupo heme para biliverdina, sugerindo um mecanismo alternativo de detoxicação celular, representando um alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de quimioterápicos antimaláricos. A obtenção da enzima PfHO recombinante solúvel e pura permitirá o avanço nas etapas de elucidação da estrutura 3D, permitindo a identificação dos elementos estruturais responsáveis pelo processo de reconhecimento molecular e seletividade desta enzima. Assim, construções gênicas da proteína alvo em sua forma nativa e truncada, obtidas por técnicas de biologia molecular, foram estabelecidas para aumentar as chances de sucesso na produção e purificação da proteína recombinante, possibilitando estudos estruturais posteriores. Métodos: a análise da estrutura primária da enzima PfHO revelou a presença de um peptídeo sinal e um peptídeo de endereçamento para o apicoplasto do parasita. Considerando a incerteza em relação ao tamanho destes peptídeos e a forma processada desta enzima, planejaram-se cinco construções gênicas distintas (PfHOint, PfHO1, PfHO2, PfHO3 e PfHO4), clonadas usando o sistema independente de ligase (LIC) (3), explorando três diferentes proteínas de fusão - Tiorredoxina, Substância NusA, Cauda de Hexahistina - para cada construção. Ensaios de expressão proteica foram realizados para avaliar o sistema de indução e a proporção de proteína recombinante presente na fração solúvel. Após a escolha das melhores condições de expressão, as proteínas foram expressas em uma escala maior e submetidas a etapas sequenciais de purificação cromatográfica. Ensaios de cristalização foram realizados após a confirmação do grau de pureza de cada amostra. Resultados parciais: todas as construções planejadas foram clonadas com sucesso. Os ensaios de expressão revelaram as melhores condições de expressão para cada construção, permitindo com que, até o presente, duas construções (PfHO3 e PfHO4) fossem expressas e purificadas com rendimento adequado (20 mg/L). Obtiveram-se cristais para ambas as construções e ensaios de difração de raios X estão em andamento. Análises biofísicas serão realizadas com as proteínas obtidas e juntamente com técnicas de biologia celular poderão elucidar a forma funcional desta enzima e orientar o processo de determinação da estrutura 3D. Estudos estruturais integrados com técnicas modernas de química medicinal permitirão a identificação e o planejamento de novos candidatos a fármacos para o alvo molecular proposto.

Palavras-chave: Heme oxigenase. Malária. Construções gênicas.

Referências:

- 1 SNOW, R. W. et al. The global distribution of clinical episodes of *Plasmodium falciparum* malaria. **Nature**, v. 434, n. 7030, p. 214-271, 2005.
- 2 OKADA, K. The novel heme oxygenase-like protein from *Plasmodium falciparum* converts heme to bilirubin IXalpha in the apicoplast. **FEBS Letters**, v. 583, n. 2, p. 313-319, 2009.
- 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.

PG94

Moléculas de KRb no estado vibracional fundamental

MARANGONI, Bruno Spolon¹; MENEGATTI, Carlos Renato¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹
bruno.marangoni@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho, iremos apresentar o processo de carregamento e caracterização de uma armadilha de dipolo cruzada para os elementos 39K, 85Rb e 87Rb utilizando um laser banda larga em 1070 nm. Como não há na literatura um carregamento desse tipo para o 39K, uma caracterização mais apurada para esse elemento foi realizada. (1) Em seguida, realizamos o carregamento da armadilha de dipolo com duas espécies atômicas ao mesmo tempo: 39K + 85Rb e 39K + 87Rb. Devido a banda larga do laser de dipolo (~ 3 nm), há fortes evidências da formação de moléculas de KRb e de um auto bombeamento dessas moléculas para níveis vibracionais mais baixos ($v < 15$). Como prova do processo fotoassociativo, mostraremos uma análise das perdas via dois corpos dos elementos atômicos e a evolução da temperatura na armadilha dipolar, descartando a possibilidade de transições do tipo Ramam estarem interferindo de maneira significativa nas perdas. (2)

Palavras-chave: Moléculas. Armadilha de dipolo. Estado vibracional.

Referências:

- 1 MARANGONI, B. S.; MENEGATTI, C. R.; MARCASSA, L. G. Loading a K crossed optical dipole trap from a magneto-optical trap. **Journal of Physics. B: Atomic Molecular and Optical Physics**, v. 45, p. 175301, 2012.DOI:10.1088/0953-4075/45/17/175301.
- 2 LAUBER, T.; KUBER, J.; WILLE, O.; BIRKL, G. Optimized Bose-Einstein-condensate production in a dipole trap based on a 1070-nm multifrequency laser: Influence of enhanced two-body loss on the evaporation process. **Physical Review A**, v. 84, p. 043641, 2012.DOI:10.1103/PhysRevA.84.043641.

PG95

Nanomateriais teranósticos aplicados à problemática do câncer e estudos de nanotoxicidade

MARANGONI, Valeria Spolon¹; ZUCOLOTTI, Valtencir¹

valeria@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nanoestruturas multifuncionais que combinem especificidade e funções terapêuticas e de diagnóstico em um único complexo nanoestruturado, chamados de teranósticos, têm se mostrado interessantes para diversas aplicações, principalmente no diagnóstico precoce e tratamento de doenças como câncer. (1) A versatilidade destas estruturas baseadas em nanomateriais advém da possibilidade de incorporação de vários tipos de moléculas na superfície de uma única nanopartícula, fazendo com que desempenhem múltiplas funções. Desta maneira, este projeto tem como objetivo desenvolver materiais nanoestruturados compostos por *nanorods* metálicos, polímeros e biomoléculas de reconhecimento para aplicações no diagnóstico e tratamento de câncer. Inicialmente, *nanorods* de ouro foram sintetizados usando crescimento mediado por nucleação na presença de nitrato de prata e brometo de hexadeciltrimetilamônio (CTAB). (2) Estas partículas apresentaram banda de ressonância plasmônica em aproximadamente 700 nm, o que é importante devido à baixa absorção de água e hemoglobina nesta região, facilitando a penetração da radiação nos tecidos. (3) O tamanho e morfologia serão caracterizados por Microscopia Eletrônica de Transmissão e Espalhamento de Luz Dinâmico. A estas estruturas serão incorporadas biomoléculas de reconhecimento e antitumorais, permitindo que estas drogas sejam direcionadas especificamente para o tumor e liberadas pelo aquecimento provocado por fototermia. As interações entre estes compostos serão analisadas por técnicas espectroscópicas e de calorimetria, visando a obtenção de sistemas com elevada estabilidade e propriedades bem definidas que são requeridas para aplicações em medicina. Estes nanocomplexos serão, ainda, avaliados quanto a sua toxicidade *in vitro* bem como sua especificidade e interação com diferentes tipos de células tumorais e saudáveis.

Palavras-chave: Nanomateriais teranósticos. Nanorods. Nanotoxicidade.

Referências:

- 1 BARDHAN, R.; LAL, S.; JOSHI, A.; HALAS, N. J. Theranostic nanoshells: from probe design to imaging and treatment of cancer. **Accounts of Chemical Research**, v. 44, n. 10, p. 936-946, 2011.
- 2 CONG, H.; TOFTEGAARD, R.; ARNBJERG, J.; OGILBY, P. R. Silica-coated gold nanorods with a gold overcoat: controlling optical properties by controlling the dimensions of a gold-silica-gold layered nanoparticle. **Langmuir**, v. 26, n. 6, p. 4188-4195, 2010.
- 3 WEISSLEDER, R. A clearer vision for *in vivo* imaging. **Nature Biotechnology**, v. 19, p. 316-317, 2001. DOI:10.1038/86684.

PG96

Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco *Gymnotus carapo*

MATIAS, Paulo¹; SLAETS, Jan Frans Willem¹

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*), 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*. **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.

PG97

Modelagem in silico da absorção intestinal humana através da permeabilidade em células Caco-2

MATOS, Karina Silvia¹; MODA, Tiago Luiz¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

karinamatos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Por questões de mercado, conveniência e segurança, os fármacos administrados por via oral são sempre os preferidos. Nesse âmbito, diversos fatores devem ser extensivamente estudados elucidando a possibilidade dessa rota de entrada dos fármacos. Após a administração, o fármaco deve passar por vários processos, entre eles: ser dissolvido e solubilizado no trato gastrointestinal para que possa ser absorvido no estômago, ou através do intestino. Este último, denominado absorção intestinal humana (do inglês, Human Intestinal Absorption - HIA) é um dos mais importantes para fármacos que atuam por via oral. (1) O emprego de modelos in silico foi reconhecido na última década como de fundamental importância na pesquisa e desenvolvimento de fármacos (P&D) devido as suas aplicações na avaliação de substâncias bioativas quanto as suas propriedades físico-químicas, farmacocinéticas. (2) Neste sentido, há interesse significativo em estudos de absorção intestinal humana por modelo de células Caco-2, devido à sua maior simplicidade, frente aos estudos in vitro e in situ, e notável similaridade bioquímica e morfológica com o epitélio do intestino delgado. No presente trabalho são descritos modelos in silico preditivos integrados para investigação dos parâmetros que definem a permeabilidade de compostos bioativos em células Caco-2. Mais de uma centena de compostos associados aos seus valores experimentais de permeabilidade Caco-2 (3), foram modelados usando o método de fragmentos moleculares: holograma QSAR (HQSAR) presente na plataforma SYBYL X 2.0. Os resultados da modelagem serão mostrados posteriormente.

Palavras-chave: Absorção intestinal humana. Modelagem in silico. Células Caco-2.

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 MAY, M. **Simulations vs. cells in ADME/Tox**. Disponível em: <<http://www.dddmag.com/products/2011/10/simulations-vs-cells-adme/tox>>. Acesso em: 15 ago. 2012.
- 3 HOU, T. J.; ZHANG, W.; XIA, K.; QIAO, X. B.; XU, X. J. ADME evaluation in drug discovery. 5. correlation of Caco - 2 permeation with simple molecular properties. **Journal of Chemical Information and Computer Sciences**, v. 44, n. 5, p. 1585 -1600, 2004.

PG98

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

MATSUYAMA, Bruno Yasui¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹

brunomatsuyama@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A formação do biofilme está associado a diversos fatores externos como quantidade de nutrientes e presença de antibióticos, contudo 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 a adesão celular e a síntese da matriz exopolissacarídica, controlando a formação do biofilme, responsável por diversas doenças infecciosas. (1) Poucos alvos moleculares foram identificados até o momento, entre eles, FleQ de *Pseudomonas aeruginosa* (PA), um fator de transcrição responsável pela expressão dos genes flagelares e que também atua no controle da síntese de exopolissacarídeos. Acredita-se que essa última função é regulada por uma segunda proteína, FleN, e que na presença de cdiGMP, FleQ deixa de ser um repressor para ser um ativador da formação do biofilme. (2) Estudos recentes apontam que a FleQ de *Xanthomonas campestris* também está envolvida na expressão de genes flagelares, contudo, atuando na repressão desse processo, sugerindo que FleQ apresente distintas funções em diferentes bactérias. (3) A alta identidade entre FleQ de *Xanthomonas axonopodis* pv. *citri* (XAC) com a de PA, leva a possibilidade de que esta também seja um receptor de c-di-GMP. Estudos de ITC apresentados neste trabalho, identificam o Mg como cofator essencial para a interação entre FleQ PA e cdiGMP, sendo n de 2 para a interação e com Kb de 5,95uM. Ensaios cristalográficos permitiram a resolução estrutural dos domínios AAA e FleQ da FleQ XAC com resolução de 2Å e 1,7Å respectivamente. O domínio FleQ é semelhante ao de receptores de resposta, contudo, não apresenta sítio de fosforilação, típico dessas estruturas. Além disso, alinhamento múltiplo de sequências que apresentam o domínio FleQ mostram uma região conservada distinta da encontrada para os domínios REC. Ensaios para caracterizar a FleQ XAC como receptora de c-di-GMP e resolução estrutural da proteína de PA estão sob andamento. A longo prazo, esses estudos poderão levar ao desenvolvimento de novas ferramentas e alvos para o desenvolvimento de agentes terapêuticos contra infecções bacterianas.

Palavras-chave: Bbiofilme. c-di-GMP. FleQ.

Referências:

1 TOOLE, G.O.; KAPLAN, H.B.; KOLTER, R. Biofilm formation as microbial development. **Annual Review Microbiology**, v.54:p.49-79,2000.

2 BARAQUET,B.; MURAKAMI, K.; PARSEK, M.R.; HARWOOD, C.S. The FleQ protein from *Pseudomonas aeruginosa* functions as both a repressor and an activator to control gene expression from the pel operon promoter in response to cdiGMP. **Nucleic Acids Research**, p.1 - 12, May 2012.DOI: 10.1093/nar/gks384.

3 TAO, J.; HE, C. Response regulator, VemR, positively regulates the virulence and adaptation of *Xanthomonas campestris* pv. *campestris*. **FEMS Microbiology** , v. 304, n.1, p. 20-28, 2010.

PG99

Teletransporte de superposições espaciais e litografia atômica via Stern-Gerlach óptico

MAXIMO, Carlos Eduardo¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

carlosoeduardo@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Denomina-se Stern-Gerlach óptico (SGO) (1-2) o fenômeno caracterizado pela deflexão de um feixe atômico decorrente de sua interação com o campo de radiação de uma cavidade. Em função da interação ressonante dos átomos com o modo da cavidade, estes adquirem momentos transversais à direção de propagação do feixe incidente, perpendicular ao eixo óptico da cavidade. Assim, os átomos são espalhados ao longo deste eixo. Neste projeto pretendemos apresentar um protocolo para a realização do teletransporte (3) de superposições atômicas espaciais utilizando-se do SGO. Desejamos também analisar as potencialidades de utilização de um SGO de duas cavidades para a realização de litografia atômica. Este SGO compreende um arranjo de duas cavidades ao invés de uma, dispostas de forma que seus eixos ópticos sejam perpendiculares. Devemos considerar a interação ressonante desses átomos com dois modos idênticos, cada qual de uma cavidade, de forma que os átomos adquiram momentos transversais à direção de propagação, distribuídos no plano definido pelos eixos de ambas as cavidades. A litografia atômica deve resultar do possível controle da direção de deflexão dos átomos através da preparação dos estados dos modos das cavidades.

Palavras-chave: Stern-Gerlach óptico. Teletransporte. Litografia atômica.

Referências:

1 FREYBERGER, M.; HERKOMMER, A. Probing a quantum state via atomic deflection. **Physical Review Letters**, v.72, n.13, p.1952-1955, 1994.

2 SLEATOR, T. ; PFAU, T. ; BALYKIN, V.; CARNAL, O.; MLYNEK, J. Experimental demonstration of the optical Stern-Gerlach effect. **Physical Review Letters**, v 68, n.13, p.1996-1999, 1992.

3 BENNETT, C. H et al. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. **Physical Review Letters**, v. 70, n.13, p.1895-1899, 1993.

PG100

Estudo estrutural e óptico de filmes finos do sistema Y2O3-Al2O3-SiO2-Er2O3 via método Pechini e evaporação por feixe de elétrons

MENDES, Alessandra Carla¹; HERNANDES, Antonio Carlos¹; MAIA, Lauro June Queiroz²; SIU LI, Maximo¹
alecarlausp@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás

Fases do sistema $Y_2O_3-Al_2O_3$ dopadas com íons de Er^{3+} exibem potencial aplicação em amplificação óptica e guias de onda. Em compostos de ítrio-aluminossilicatos, a adição de sílica tem mostrado um aumento da solubilidade e dispersão dos íons de Er^{3+} nestas matrizes. (1) Resinas com $(100-x) Y_3Al_5O_{12} - (x) SiO_2$ ($x = 0, 10, 20, 30, 50, 60$ e 70% em mol) dopadas com 1% em mol de Er_2O_3 foram sintetizadas via método sol-gel/Pechini, usando água e etanol como solventes. Partindo da resina pré-tratada a $400\text{ }^{\circ}C$, pós foram obtidos após tratamentos térmicos (que variaram de 800 a $1000\text{ }^{\circ}C$) com o intuito de avaliar as propriedades ópticas dos íons de Er^{3+} nestas matrizes. Dessa forma, espectros de fotoluminescência (FL) (na região do visível e infravermelho) e medidas de tempo de vida médio do estado metaestável $^4I_{13/2}$ dos íons de érbio (emissão em 1540 nm) foram estudados. Para avaliar a influência das propriedades estruturais com as propriedades de FL, diversas técnicas foram utilizadas, como: difração de raio-x, espectroscopia vibracional no infravermelho, análise térmica diferencial e termogravimétrica e microscopia eletrônica de varredura de alta resolução. Encontrada a composição com maior emissão em 1540 nm (pó com 30% em mol de SiO_2 tratado a $1000\text{ }^{\circ}C$ - etanol como solvente), filmes finos foram preparados pela técnica de evaporação por canhão de elétrons. Nesta etapa, além de aumentar a concentração de Er_2O_3 (5% em mol), a adição de GeO_2 à matriz foi também considerada (por favorecer a evaporação do érbio). Diferentes composições foram estudadas: $y\%$ YAG - 30% GeO_2 - $(70-y) SiO_2$, com y variando de 10 a 60% em mol. A composição com $y = 40$ exibiu maior emissão em 1540 nm . Juntamente com as propriedades ópticas, as propriedades térmicas e estruturais destes filmes também foram estudadas utilizando-se técnicas como: microscopia de força atômica e espectroscopia M-line. Também se verificou que a adição de GeO_2 viabiliza o estudo de efeitos fotossensíveis como a fotocontração. Os resultados obtidos mostraram a viabilidade de aplicação desses filmes como amplificadores ópticos planares. Filmes com a mesma composição, porém obtidos a partir da resina pela técnica de spin-coating, também estão sendo preparados com o intuito de comparar suas propriedades ópticas e estruturais com as obtidas pela técnica de evaporação por canhão de elétrons.

Palavras-chave: Método Pechini. Filmes finos. Fotoluminescência.

Referências:

1 JANDER, P.; BROCKLESBY, W. S. Spectroscopy of yttria-alumina-silica glass doped with thulium and erbium. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 40, n. 5, p. 509-512, 2004.

PG101

Engenharia de interações lineares e não lineares

MERCADO, Wilson Enrique Rosado¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

we.rosado@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho desenvolvemos um protocolo para a engenharia de interações seletivas não lineares de Jaynes-Cumming que contemplam transições de um, dois e três fótons. Consideramos, em seguida, a aplicação destas interações seletivas para a preparação de estados de Fock e para o desenvolvimento de técnicas de proteção destes estados. Em particular, consideramos também a aplicação das interações seletivas de Jynes-Cumming para engenharia de reservatórios atômicos específicos que permitem a geração de estados de Fock como, equilíbrios de modos de cavidade. Além do que, pretendemos, também pretendemos neste Projeto aplicar o programa da engenharia de reservatórios às redes de cavidades preenchidas por amostras atômicas e, possivelmente, à teoria do laser. No primeiro caso, pretendemos estender o programa da engenharia de reservatórios para a proteção de estados emaranhados envolvendo sistemas espacialmente separados, como amostras atômicas ou polaritons localizados em diferentes cavidades da rede. Além da proteção de estados emaranhados de sistemas mesoscópicos, devemos analisar a implementação de processos como a transferência de estados do campo, dos átomos, ou de suas combinações —os polaritons— entre cavidades distintas, perseguindo, via engenharia de reservatórios, a maximização das suas fidelidades. Objetivamos também analisar a possibilidade de se aplicar a engenharia de reservatórios para a manipulação das propriedades da radiação laser. Posto que a engenharia de reservatórios consiste em submeter o sistema de interesse a interações auxiliares que acarretam a modificação da estrutura do operador Liouvilliano associado aos efeitos do reservatório, pretendemos submeter o meio ativo do laser a diferentes interações com campos de radiação adicionais e analisar suas consequências.

Palavras-chave: Interações seletivas . Engenharia de reservatórios . Preparação e proteção de estados .

Referências:

- 1 SANTOS, M. França; SOLANO, E.; MATOS FILHO, R. L. Conditional large Fock state preparation and field state reconstruction in cavity QED. **Physical Review Letters**, v. 87, p. 093601-1-093601-4, 2001. DOI:10.1103/PhysRevLett.87.093601.
- 2 PRADO, F. O.; DUZZIONI, E. I.; MOUSSA, M. H. Y.; ALMEIDA, N. G. de ;VILLAS BOAS, C. J. Nonadiabatic coherent evolution of two-level systems under spontaneous decay. **Physical Review Letters**, v. 102, p. 073008-1-073008-4, 2009. DOI:10.1103/PhysRevLett.102.073008.
- 3 CACHEFFO, A.; PONTE, M. A. de; MOUSSA, M. H. Y.; CASTRO, A. S. M. de. Quasi-perfect state transfer in a bosonic dissipative network. **Journal of Physics B: Atomic Molecular Optics Physics**, v. 43, p.105503-1-105503-12, 2010. DOI:10.1088/0953-4075/43/10/105503.

PG102

Caracterização da Enterococcal leucine-rich protein A (ElrA) de *Enterococcus faecalis*

MERLO, Thaís Panhan¹; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha¹; NASCIMENTO, Alessandro Silva²; SERROR, Pascale³

thais.merlo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centro de Engenharia, Modelagem e Ciências Sociais Aplicadas - UFABC

³Unidade de Bactérias Lácticas e Patógenos Oportunistas da França - INRA

Enterococcus faecalis é um dos principais patógenos nosocomiais relatados, sendo causador de sepse e choque séptico em pacientes imunocomprometidos. (1) Vários fatores de virulência foram relatados para *E. faecalis*, dentre eles a *Enterococcal leucine-rich protein A* (ElrA). (2) A ElrA é uma proteína de superfície semelhante às internalinas com domínio WxL. O domínio WxL está localizado na porção C-terminal e promove a interação da proteína com peptidoglicanos na parede celular da *E. faecalis*, conferindo a localização na superfície das células para proteínas que apresentam este domínio. (3) O objetivo deste estudo é aprofundar o conhecimento sobre a ElrA e o domínio WxL, através de estudos estruturais, de modelagem molecular e de prevalência do gene *elrA* em linhagens de *E. faecalis* resistentes a vancomicina obtidas em pacientes infectados com a bactéria. A modelagem molecular computacional de parte da proteína ElrA foi realizada por homologia, utilizando-se o programa MODELLER, confirmando a estrutura do tipo ferradura, esperada para o domínio rico em repetições de leucina da proteína. A estrutura do domínio proteico WxL não pôde ser predita por homologia por não haver estruturas resolvidas semelhantes o suficiente com ele no PDB (*Protein Data Bank*). Os testes de prevalência foram realizados através de reação de PCR com os primers para o gene *elrA* e o gene foi encontrado em todas as amostras testadas, diferente de testes realizados anteriormente, nos quais algumas amostras de origem clínica não continham o gene. (2) A expressão e a purificação da ElrA estão sendo padronizadas para posteriores ensaios de dicroísmo circular (CD), espalhamento dinâmico de luz (DLS) e teste de interação da proteína com a membrana plasmática, o qual será realizado utilizando-se filmes de Langmuir que mimetizam esta membrana. Da mesma forma, a expressão e purificação do domínio WxL estão sendo realizadas, juntamente com os estudos estruturais e de interação com a membrana plasmática. O estudo da ElrA é importante para gerar um maior entendimento das infecções causadas por *E. faecalis*, uma vez que esta proteína está envolvida na virulência da bactéria. A estrutura proteica predita pode ser utilizada futuramente na identificação de ligantes e de pequenas moléculas que possam agir como inibidores da proteína ElrA, atenuando o processo infeccioso.

Palavras-chave: *Enterococcal leucine-rich protein A*. *Enterococcus faecalis*. Fator de virulência.

Referências:

1 LINDEN, P. Can enterococcal infections initiate sepsis syndrome?. **Current Infectious Disease Report**, v. 5, n. 5, p. 372 - 378, 2003.

2 BRINSTER, S.; POSTERARO, B.; BIERNE, H.; ALBERTI, A.; MAKHZAMI, S.; SANGUINETTI, M.; SERROR, P. Enterococcal leucine-rich repeat-containing protein involved in virulence and host inflammatory response. **Infection and Immunity**, v. 75, n. 9, p. 4463 - 4471, 2007.

3 BRISNTER, S.; FURLAN, S.; SERROR, P. C-terminal WxL domain mediates cell wall binding in *Enterococcus faecalis* and other gram-positive bacteria. **Journal of Bacteriology**, v.189, n. 4, p. 1244 - 1253, 2007.

PG103

Bioquímica estrutural das enzimas envolvidas na biossíntese de c-di-AMP em *Staphylococcus aureus*

MESQUITA, Nathaly Cristina de Moraes Roso¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹
nathy_physics@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Staphylococcus aureus é um importante patógeno humano que coloniza principalmente as vias nasais e cutâneas, podendo levar a uma série infecções invasivas. Na atualidade têm-se visualizado o aumento dos casos de infecções ocasionados por cepas super-resistentes a diversos antibióticos, o que é um indício da necessidade de buscar outros tratamentos. (1-2) Dessa forma, novos alvos para o desenvolvimento de fármacos têm sido explorados e a parede celular bacteriana, a qual contém estruturas essenciais para a habilidade de infecção deste agente, surge como uma grande oportunidade de pesquisa. É descrito na literatura que o ácido lipoteicóico (LTA) (3), é essencial para o crescimento das cepas super-resistentes de *S. aureus*, porém mutantes incapazes de sintetiza-los recuperam um crescimento quase normal após uma mutação adicional no gene que codifica a enzima fosfodiesterase Sa_GdpP. Juntamente com a di-adenilato ciclase Sa_DacA, Sa_GdpP é responsável pela manutenção dos níveis intracelulares do novo sinalizador bacteriano c-di-AMP, sendo que concentrações elevadas dessa molécula aumentam a capacidade da bactéria de lidar com estresses na sua parede celular. Com o intuito de se compreender os mecanismos moleculares de biossíntese do c-di-AMP em *S. aureus*, nosso estudo está centrado no estabelecimentos de protocolos de produção heteróloga das porções solúveis da SA_DacA e da SA_GdpP, visando a obtenção de suas estruturas cristalográficas. Resultados iniciais levaram à purificação em larga escala de uma construção de Sa_DacA e obtenção de cristais proteicos. A enzima mostrou-se ativa em ensaios enzimáticos e atualmente os cristais estão sendo otimizados para possibilitar uma coleta completa de dados de difração. Juntamente a tal técnica de cristalização de raios X, pretendemos fazer uso de caracterizações biofísicas e bioquímicas com a finalidade de se propor mecanismos de atividade para essas duas enzimas. Os resultados gerados poderão fornecer uma base para criação de novas terapias contra a infecção de cepas super-resistentes de *S. aureus*.

Palavras-chave: c-di-AMP. *Staphylococcus aureus*. Cristalização.

Referências:

- 1 FRANCIS, J.S.; DOHERTY, M.C.; LOPATIN, U.; JOHNSTON, C.P.; SINHA, G. Severe community-onset pneumonia in healthy adults caused by methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* carrying the Panton-Valentine leukocidin genes. **Clinical Infectious Diseases**, v. 40, n.1, p.100-107, 2005.
- 2 FRIDKIN, S. K. et al. Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* disease in three communities. **New England Journal of Medicine**, v.352, n.14, p.1436-444, 2005.
- 3 CORRIGAN, R. M.; ABBOTT, J. C.; BURHENNE, H.; KAEVER, V.; GRÜNDLING, A. c-di-AMP Is a new second messenger in *Staphylococcus aureus* with a role in controlling cell size and envelope stress. **PLoSPathogens**, v. 7, n. 9, p.167- 178, 2011.

PG104

Medição de efeitos coletivos na pressão de radiação sobre nuvens ultrafrias de estrôncio

MIGUEZ, Maria Luiza¹; COURTEILLE, Philippe Wilhelm¹

malumiguez@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Gases atômicos ultrafrios são objetos interessantes para o estudo de efeitos fundamentais, forças fracas e o impacto de fenômenos quânticos sobre sistemas macroscópicos. Por exemplo, abaixo de uma temperatura crítica eles sofrem uma transição de fase para um estado de movimento coletivo chamado condensado de Bose-Einstein. Gases atômicos ultrafrios estão livres de todas as perturbações relacionadas ao movimento atômico, o que permite a detecção de efeitos e ainda de instabilidades coletivas devido ao recuo transmitido para a nuvem atômica por fótons individuais injetados. Átomos de estrôncio são ideais para esses estudos, por causa da existência de uma transição atômica mais fina do que o deslocamento de frequência induzido pelo recuo de um só fóton. Isso permite evitar o espalhamento múltiplo e o aprisionamento de radiação. Por outro lado, a transição é suficientemente larga para ser possível resfriar a nuvem com lasers usando uma armadilha magneto-óptica com boa eficiência até temperaturas em torno de $1\mu\text{K}$. (1) O nosso maior interesse é chegar a uma melhor compreensão dos efeitos coletivos no espalhamento de fótons em amostras atômicas desordenadas respondendo a algumas das seguintes questões. Em quais circunstâncias podemos esperar espalhamento superradiante ou subradiante? Podemos observar o deslocamento coletivo de Lamb? Qual é o papel das fronteiras da nuvem atômica? Podemos observar ressonâncias de Mie? Como o momento fotônico é modificado por efeitos coletivos? O recuo fotônico é transmitido à um átomo individual ou é compartilhado por todos átomos? Construimos no Instituto de Física de São Carlos uma montagem de vácuo para preparação de nuvens ultrafrias de estrôncio. A primeira fase, isto é, o pré-resfriamento de átomos de estrôncio transferidos de um desacelerador Zeeman para uma armadilha magneto-óptica operada numa transição larga já está quase operacional. A tarefa agora será expandir a montagem para incluir uma segunda fase de resfriamento por uma armadilha magneto-óptica operada numa transição fina. Ainda é necessário otimizar e caracterizar melhor as armadilhas e medir a temperatura obtida.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Armadilha magneto-óptica. Estrôncio .

Referências:

1 STELLMER, S.; TEY, S. M. K ; HUANG, S. M. B.; GRIMM, R.; SCHRECK, F. Bose-Einstein condensation of strontium. **Physical Review Letters**, v.103, p. 200401, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.200401.

PG105

Interação de compostos com atividade sobre a enzima cruzaina em monocamadas de Langmuir como modelo de membrana celular

MONTANHA, Érica Azzolino¹; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹
erica.montanha@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A enzima cruzaina é a principal cisteína protease do *Trypanosoma cruzi*, agente etiológico da doença de Chagas, e portanto valioso alvo para novos fármacos contra essa infecção. Neste trabalho será investigada a interação de uma classe de compostos que atuam sobre a cruzaina com modelos de membrana celular, constituídos por filmes de Langmuir, com o objetivo de identificar candidatos a fármacos. As monocamadas de Langmuir são formadas ao se espalhar material anfifílico na interface ar-água. (1) Com a compressão por barreiras móveis, pode-se simular diferentes estágios de compactação de uma membrana, cujas propriedades mecânicas e elétricas podem ser inferidas de medidas de pressão e potencial de superfície. Será usado o fosfolípido fosfatidilcolina de dipalmitoila (DPPC) para formar os filmes de Langmuir, interagindo com compostos que agem sobre a cruzaina. Buscar-se-á determinar a localização dos compostos e como estes afetam as propriedades do filme de Langmuir, principalmente a elasticidade. Os resultados serão relacionados com aqueles obtidos da interação dos compostos com a enzima cruzaina em outros sistemas, na busca do melhor candidato a fármaco que possivelmente exerce maiores efeitos sobre a membrana.

Palavras-chave: Monocamadas de Langmuir. Modelo de membrana celular. Inibidores de cruzaina.

Referências:

1 LANGMUIR, Irving. The constitution and fundamental properties of solids and liquids. *Journal of the American Chemical Society*, v. 39, n. 9, p. 1848-1906, 1917.

PG106

Análise dos tempos de relaxação de núcleos de ^1H de moléculas de água confinadas em poros de cerâmicas de alumina

MONTRAZI, Elton Tadeu¹; FORTULAN, Carlos Alberto²; FONTES, Sérgio Rodrigues²; BONAGAMBA, Tito José¹
elton.montrazi@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Engenharia de São Carlos - USP

A caracterização de meios porosos semelhantes às rochas de reservatório de petróleo e gás tem sido bastante explorada por medidas de tempos de relaxação transversal (T_2) por ressonância magnética nuclear, em núcleos de hidrogênio (^1H) confinados nestes poros. (1-2) As rochas reservatórios são meios bastantes complexos que possuem muitas impurezas paramagnéticas, o que dificulta a análise dos resultados de T_2 . Devido principalmente a este fato, foi proposto o estudo cerâmicas de alumina, na qual é possível se obter um controle dos tamanhos de poros e impurezas. (3) Teoricamente, supondo poros aproximadamente convexos, a distribuição de tempos de relaxação está relacionada com a distribuição de tamanho de poros na amostra. (1-2) Devido ao controle do processo de fabricação, é possível preparar cerâmicas com distribuições de tamanho de poros diferentes e então observar o comportamento das distribuições de T_2 . A cerâmica de alumina possui uma porosidade intrínseca, adicionalmente a esta porosidade é possível controlar o tamanho dos poros adicionando cristais de sacarose com tamanhos conhecidos no momento de preparo antes da sinterização. No processo de queima da cerâmica, estes cristais são degradados e volatilizados e os espaços vazios deixados se tornam os poros chamados de poros induzidos. (3) Para realização dos experimentos de RMN as cerâmicas são saturadas com água mili-q, e através da sequência de pulsos Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG) (1-2) são obtidas as curvas de T_2 dos núcleos de ^1H confinados na cerâmica e, a partir destas, determinaram-se as distribuições de T_2 para cada amostra através da transformada inversa de Laplace.

Palavras-chave: RMN. Meios porosos. Cerâmica.

Referências:

- 1 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D. J. **Nuclear magnetic resonance:** petrophysical and logging applications. New York: Pergamon, 2002. 293p. ISBN 0-08-043880-6.
- 2 COATES, G. R.; XIAO, L.; PRAMMER, M. G. **NMR logging:** principles & applications. Houston: Halliburton Energy Services, 1999. 234p. ISBN 0-96-790260-6.
- 3 MONTRAZI, E. T. **Estudos de cerâmicas porosas de alumina através da medida de tempos de relaxação via ressonância magnética nuclear.** 2012. 164p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

PG107

Desenvolvimento de técnicas de precessão livre no estado estacionário (SSFP) com alternância de fase para aquisição rápida de espectros de RMN em alta resolução

MORAES, Tiago Bueno de¹; COLNAGO, Luiz Alberto²

tiago.moraes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação

A precessão livre no estado estacionário (SSFP) consiste na aplicação de uma sequência de pulsos de mesma fase, amplitude e duração, espaçados por um tempo T_p muito menor que os tempos de relaxação T_1 e T_2 . Essa sequência é extensivamente utilizada em baixa resolução para aquisições rápidas de sinais de RMN obtendo excelente razão s/r. (1) Em alta resolução, a SSFP introduz sérias anomalias de fase e amplitude, e por isso ainda é pouco explorada na comunidade científica. Essas anomalias são provenientes da presença do eco no sinal FID adquirido e vários métodos têm sido propostos para contornar esse problema. (3) As duas principais técnicas foram a Scrambled Steady State e a Quadrige Fourier Transform, apesar de apresentarem bons resultados, não foram capazes de suprimir completamente as anomalias dos espectros. Recentemente, Rudakov e colaboradores (2) propuseram a utilização da SSFP com alternância de fase para ressonância quadrupolar nuclear e numa série de artigos publicaram os bons resultados obtidos. O objetivo do presente trabalho foi avaliar a supressão das anomalias espectrais na SSFP com alternância de fase em alta resolução. Para isso foram avaliadas as sequências SSFPx-x e SSFPxx-x-x. A estabilização do estado estacionário e o comportamento da magnetização em sequências rápidas como a SSFP são dependentes de uma série de parâmetros. Tempos de relaxação (T_1 e T_2), ângulo de rotação do pulso e sua fase θ_φ , tempo entre pulsos (T_p) e offset (Tof), causam consideráveis modificações na amplitude da magnetização e no estabelecimento do estado estacionário. Visando uma melhor compreensão dos efeitos desses parâmetros nas sequências SSFP, foram previamente desenvolvidos códigos em Matlab para simular as equações de Bloch. Os sinais de 1H e ^{13}C foram adquiridos no espectrômetro Varian Inova 9,4 T e no espectrômetro Apollo 0,5 T. Os testes foram realizados com amostra de H_2O/D_2O para 1H e Acetato Etila/ $CDCl_3$ para ^{13}C . Através da SSFP com alternância de fase, bons resultados estão sendo obtidos e o estudo de novas sequências com alternância de fase está em andamento.

Palavras-chave: RMN. SSFP. CWFP.

Referências:

- 1 VENÂNCIO, T.; ENGELSBERG, M; AZEREDO, R. V.; ALEM, N. E.; COLNAGO, L. A. Fast and simultaneous measurement of longitudinal and transverse NMR relaxation times in a single continuous wave free precession experiment. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 173, n. 1, p. 34-39, 2005.
- 2 RUDAKOV, T. N.; BELYAKOV, A. V. Modifications of the steady-state free-precession sequence for the detection of pure nuclear quadrupole resonance. **Journal of Physics D**, v. 31, n. 10, p. 1251-1256, 1998.

3 SCHWENK, A. NMR pulse technique with high sensitivity for slowly relaxing systems. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 5, n. 3, p. 376-389, 1971.

PG108

Estudos bioquímicos e estruturais do complexo SEPT5/7/8

MORAIS, Sinara Teixeira do Brasil¹; ARAÚJO, Ana Paula Ulian¹

sinarateixeira@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas formam uma família de proteínas filamentosas, pertencentes à classe das GTPases. Tais proteínas foram inicialmente identificadas em *Saccharomyces cerevisiae*, sendo mais tarde encontradas também em organismos eucariotos superiores, com exceção das plantas. As septinas foram associadas a diversos processos celulares, tais como, divisão celular, apoptose e exocitose, podendo ainda estar relacionadas com o surgimento de cânceres e doenças neurológicas. Tipicamente, as septinas apresentam 3 domínios: um N-terminal variável, que pode incluir uma região polibásica que interage com a membrana; um C-terminal que pode conter sequências *coiled-coil*, ambos flanqueando um terceiro domínio central denominado domínio de ligação ao GTP. Em humanos são encontrados 13 genes que codificam para septinas, as quais se dividem em 4 grupos com base na similaridade de sua organização estrutural. Tais proteínas podem se polimerizar formando complexos hetero-oligoméricos com alto grau de organização. Ainda hoje, 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) Assim, o objetivo desse trabalho está centrado em estudos bioquímicos e biofísicos do heterocomplexo formado pelas septinas humanas, 5, 7 e 8. A escolha de tal complexo foi baseada em resultados de interação obtidos pela técnica de duplo-híbrido em leveduras. Até o momento a clonagem das sequências codificadoras de tais proteínas foi realizada, sendo todas coexpressas na forma de um heterocomplexo. As etapas seguintes compreendem a purificação de tais proteínas heterólogas destinadas a análises bioquímicas e estruturais, como: espectroscopia de massas; análise do teor de nucleotídeos e da atividade GTPásica; bem como a determinação da posição das proteínas no complexo utilizando técnicas, como por exemplo, troca de hidrogênio por deutério e cromatografia. Paralelamente, busca-se nesse trabalho também a produção da SEPT8G α 0, isoladamente, construção que corresponde ao domínio de ligação ao GTP, visando ensaios de cristalização. A septina 8 pertence a um grupo que não hidrolisa GTP e nenhum dos membros desse grupo teve a estrutura resolvida. Dessa forma obter informações estruturais desta septina poderá contribuir para o entendimento do mecanismo catalítico das septinas.

Palavras-chave: Septinas . Heterocomplexo. Caracterização.

Referências:

1 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.

PG109

Identificação de potenciais receptores e determinantes da endocitose numa proteína inativadora de ribossomo tipo 2

MOREIRA, Heline Hellen Teixeira¹; ARAUJO, Ana Paula Ulian¹

helinetm@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A pulchellina é classificada como uma proteína inativadora de ribossomos tipo 2 (RIP tipo 2), sendo uma glicoproteína heterodimérica ligante de D-Galactose . (1) Expressa nas sementes da *Abrus pulchellus*, a pulchellina é uma potente toxina para mamíferos e outros eucariotos, apresenta-se sob diferentes isoformas as quais diferem em seus níveis tóxicos . (2) Esta toxina é um importante alvo de estudo para elucidação de mecanismos chaves que envolvem a interação das suas diferentes isoformas com glicoconjugados presentes na membrana . (3) Neste trabalho estes mecanismos também estão estudados utilizando sistemas miméticos de membrana baseados em vesículas unilamelares gigantes (GUV) constituída de diferentes composições. A outra estratégia de estudo, será a detecção e isolamento de um glicorreceptor proteico de membrana de células alvo da pulchellina. Nesta etapa, pretende-se isolar e identificar o glicorreceptor proteico usando duas diferentes abordagens: 1) Através da imobilização da pulchellina numa coluna de sepharose, a toxina será exposta as glicoproteínas previamente purificadas de frações de membrana para que possa interagir com o glicorreceptor. As glicoproteínas que se ligarão à pulchellina imobilizada serão eluídas com solução tampão contendo lactose ou D-galactose como competidor. As frações eluídas serão coletadas e submetidas para separação em gel de SDS-PAGE e posterior análise por espectrometria de massas. 2) Paralelamente, será utilizada a metodologia do kit *crosslinker* sulfoSBED trifuncional, o qual irá tornar a interação da pulchellina com seu receptor glicoproteico covalente, permitindo que o complexo seja isolado, clivado e, posteriormente, identificado utilizando espectrometria de massas.

Palavras-chave: Pulchellina. RIP tipo 2. Glicorreceptor.

Referências:

- 1 ARAUJO, A. P. U.; CASTILHO, P. V.; GOTO, L. S. Ribosome inactivating proteins from *Abrus pulchellus*. **Toxic Plant Proteins**, v. 18, p. 133-147, 2010. DOI: 10.1007/978-3-642-12176-0_7.
- 2 RAMOS, M. V.; MOTA, D. M.; TEIXEIRA, C. R.; CAVADA, B. S.; MOREIRA, R. A. Isolation and partial characterisation of highly toxic lectins from *Abrus pulchellus* seeds. **Toxicon**, v. 36, n. 3, p. 477-484, 1998.
- 3 CASTILHO, P. V.; GOTO, L. S.; ROBERTS, L.; ARAUJO, 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.

PG110

Efeitos de íons fluoretos em ambientes locais de vidros e cerâmicas oxifluoretos dopados com terras raras: estudo estrutural por métodos de ressonância magnética

MOREIRA, Raphaell¹; ECKERT, Hellmut¹

moreira@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Por apresentarem uma flexibilidade de fabricação, variedade composicional e também uma habilidade de incorporar altas concentrações de íons dopantes, cerâmicas e vidros dopados com íons terras raras têm despertado um grande interesse para aplicações tecnológicas. (1) De acordo com a literatura especializada, as ligações dos íons terras raras com fluoretos em vez de íons óxido, podem melhorar suas características de relaxação vibracional, que por sua vez resulta em um aumento considerável do tempo de vida do estado excitado e do rendimento quântico de fluorescência destes sistemas. (2) Através do aumento do número de sítios de íons luminescentes bem dispersos na matriz vítrea, previnem efeitos de supressão da luminescência tornando estes materiais importantes em aplicações ópticas. Em vista da necessidade pela busca de novas e eficientes combinações entre íon-matriz que sejam menos susceptíveis aos efeitos de supressão da luminescência por concentração, estudos detalhados das características estruturais, espectroscópicas e ópticas destes materiais são indispensáveis. Assim, o presente trabalho consistirá no desenvolvimento de uma estratégia abrangente de ressonância magnética, com o uso das técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR), visando correlacionar às informações estruturais e funcionais de vidros e cerâmicas luminescentes dopados com terras raras, e o entendimento das características fotofísicas destes sistemas, em termos das propriedades estruturais, sendo de extrema importância para o desenvolvimento de novas metodologias na confecção de novos materiais ópticos com funcionalidades específicas.

Palavras-chave: Materiais vítreos. Ressonância magnética nuclear. Terras raras.

Referências:

- 1 WEBER, M. J. Science and technology of laser glass. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 123, n. 1-3, p. 208-222, 1990.
- 2 FAN, X.; QIU, J. Rare-earth doped transparent glass-ceramics. In: TSENG, T.Y.; NALWA, H. S. (Ed.). **Handbook of nanoceramics and their based nanodevices**. 2nd ed. California, USA: American Scientific Publishers, 2009. v.2, cap.16, p. 415-440.

PG111

Radiação de uma nuvem de estrôncio

MORIYA, Paulo Hisao¹; COURTEILLE, Philippe Wilhelm¹

paulohisao@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Muitos fenômenos da interação entre luz e matéria ainda não foram totalmente compreendidos. Como exemplos, pode-se citar a questão do valor correto para a quantidade de momento que um fóton troca com um meio dielétrico, conhecido como dilema de Minkowski e Abraham, sendo necessária uma compreensão microscópica da distribuição do recuo de um fóton sobre os átomos. Outro exemplo se dá quando os fótons ficam presos dentro de nuvens atômicas devido ao compartilhamento entre todos os átomos, a sub-radiância, ou quando a desordem não permite que eles escapem, a localização de Anderson. Pela teoria em desenvolvimento em nosso grupo (1-3) sobre o espalhamento cooperativo de luz por nuvens atômicas, pode-se notar que há uma significativa alteração na pressão radiativa da luz emitida principalmente por nuvens atômicas e que esta pode ser mapeada com a teoria de Mie para a emissão de luz. (2) Foi possível também preencher a lacuna entre o espalhamento por amostras de partículas localizadas e distribuições de densidade contínuas, tais como meios dielétricos. Neste sentido, pode-se investigar halos de recuo produzidos em nuvens de condensados de Bose-Einstein por espalhamento de fótons individuais, em particular os que parecem conter uma medida direta do espalhamento da luz dentro da nuvem. (3) Para aprofundar o estudo dos efeitos coletivos e confirmar a teoria desenvolvida para uma nuvem de gás, vai-se aprimorar a armadilha magneto-óptica para confinar, resfriar e ultra resfriar átomos de estrôncio. O estrôncio foi escolhido por ser uma das mais interessantes espécies atômicas para gases quânticos devido à existência de transições de resfriamento e de relógio estreitas, resultando assim em uma versatilidade de aplicações, tais como relógios atômicos ultras precisos, computação quântica, moléculas ultra resfriadas e em testes de variação de constantes fundamentais no tempo.

Palavras-chave: Armadilhas magneto-ópticas de estrôncio. Espalhamento de luz. Efeitos coletivos.

Referências:

1 COURTEILLE, PH. W.; BUX, S.; LUCIONI, E.; LAUBER, K.; BIENAIMÉ, T.; KAISER, R.; PIOVELLA, N. Modification of radiation pressure due to cooperative scattering of light. **European Physical Journal D**, v. 58, n. 1, p. 69-73, 2010. DOI: 10.1140/epjd/e2010-00095-6 .

2 BACHELARD, R.; COURTEILLE, PH. W.; KAISER, R.; PIOVELLA, N. Resonances in mie scattering by an inhomogeneous atomic cloud. **Europhysics Letters**, v. 97, p.14004, 2012. DOI:10.1209/0295-5075/97/14004.

3 BACHELARD, R.; PIOVELLA, N.; COURTEILLE, PH. W. Cooperative scattering and radiation pressure force in dense atomic clouds. **Physical Review A**, v. 84, n.1, p. 013821, 2011. DOI: 10.1103/PhysRevA.84.013821.

PG112

Otimização crítica e criticalidade sem leis de potência

Critical optimization and criticality without power laws

MOSQUEIRO, Thiago Schiavo¹; MAIA, Leonardo Paulo¹

thiago.mosqueiro@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Redes sensoriais biológicas exibem complexos mecanismos de processamento de informação para caracterizar o ambiente externo. Na presença de algum estímulo (odor de um alimento, presença de predador, etc), receptores transformam informações físico-químicas em cadeias de disparos (spikes) que se propagam nas redes sensoriais. Os possíveis padrões de atividade, que podem ser extremamente ricos, são conhecidos como avalanches neurais e têm sido registrados em diversos sistemas na última década, tanto *in vitro* como *in vivo*. Surpreendentemente, esses padrões quase sempre revelam leis de potência para o tamanho e duração dessas avalanches, o que é um indício muito forte de que a dinâmica coletiva das unidades desta rede possa estar relacionada, em algum sentido, a uma transição de fase. No entanto, as medidas de maior resolução, obtidas muito recentemente, apontam tanto para a possibilidade de ocorrência de um fenômeno crítico quanto para a **ausência** de leis de potência puras. (1) Por outro lado, uma medida do quão bem essas redes sensoriais codificam os estímulos externos é a faixa dinâmica, que é uma medida do intervalo de intensidade dos estímulos que podem ser posteriormente decodificados de forma confiável (seja em uma rede artificial ou no córtex cerebral). Em 2006, Kinouchi e Copelli propuseram um modelo minimalista em que uma rede de autômatos celulares (fazendo o papel de neurônios), distribuídos em um grafo aleatório, apresentam uma faixa dinâmica de amplitude máxima exatamente no ponto crítico de uma transição de fase contínua. (2) Entretanto, não se conhece um mecanismo microscópico, em termos da microdinâmica da rede sensorial, que explique essa otimização. Neste trabalho, nós mostramos que a entropia da distribuição de duração das avalanches geradas pelo modelo de Kinouchi-Copelli sempre se maximiza concomitantemente com a faixa dinâmica, no ponto crítico de uma transição de fase fora do equilíbrio. Isto é digno de destaque porque a faixa dinâmica é uma medida média da sensibilidade de redes sensoriais a estímulos, enquanto que a entropia da duração de avalanches é uma medida de atividade intrínseca (livre de estímulos) e que pode ser interpretada como a eficiência com a qual uma rede sensorial pode transmitir informação. Ainda mais importante, esta otimização crítica ocorre mesmo quando a distribuição de tamanho de avalanches não exibe entropia máxima, sugerindo fortemente que a sincronizabilidade dos neurônios em uma dada topologia de interação é a questão central para que se obtenha uma performance ótima no processamento de informação, e mesmo quando a distribuição de duração das avalanches não é uma lei de potência, de acordo com os experimentos. (1) Esses resultados estão detalhados no preprint. (3)

Palavras-chave: Criticalidade. Neurociência. Avalanches.

Biological sensory networks rely on complex mechanisms of information processing to characterize external environments. In the presence of a stimulus (food odor, presence of predator,

etc), receptors transform these physico-chemical 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, these patterns almost always reveal power laws for the size and duration of these avalanches, which is a strong indicative that the collective dynamics of the units of the network can be related, in some way, to a phase transition. However, the measurements of higher resolution so far, recently obtained, point out both to the presence of a critical phenomenon and to the **lack** of pure power laws. (1) In other hand, the effectiveness of these networks in coding external stimuli can be described by the dynamic range, a measure of the interval of stimuli magnitudes that can be decoded reliably afterwards (in either artificial or biological networks). In 2006, Kinouchi and Copelli proposed a minimalist model in which a network of cellular automata (playing the role of neurons), organized in a random graph, present an optimal dynamic range exactly at the critical point of a continuous phase transition. (2) However, the microdynamical mechanisms underlying this optimization remain unknown. In this study, we show that the entropy of the distribution of avalanche lifetimes generated by the Kinouchi-Copelli model always achieve a maximum jointly with the dynamic range, i.e., at the critical point of a nonequilibrium phase transition. This is noteworthy because the dynamic range is an average measure of the network sensibility to stimuli, while the entropy of avalanche duration is an intrinsic (stimuli-free) activity measure that can be interpreted as the efficiency that a network can propagate information. Even more important, this critical optimization still occurs when the entropy of avalanche size does not maximize, strongly suggesting that the synchronizability of the neurons in a given topology is the key concept to obtain an optimal performance in the information processing, and even when the duration distribution is not a power law, which agrees with the experiments. (1) These results are in our preprint. (3)

Keywords: Criticality. Neuroscience. Avalanches.

Referências:

- 1 FRIEDMAN, N.; ITO, S.; BRINKMAN, B. A. W.; SHIMONO, M.; DEVILLE, R. E. L.; DAHMEN, K. A.; BEGGS, J. M.; BUTLER, T. C. Universal critical dynamics in high resolution neuronal avalanche data. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 20, p. 208102-1-208102-5, 2012. DOI:10.1103/PhysRevLett.108.208102.
- 2 KINOUCHI, O.; COPELLI, M. Optimal dynamical range of excitable networks at criticality. **Nature Physics**, v. 2, n. 5, p. 348-352, 2006. DOI:10.1038/nphys289.
- 3 MOSQUEIRO, T. S.; MAIA, L. P. **Optimal channel efficiency in a sensory network**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1204.0751>>. Acesso em: 5 ago. 2012.

PG113

Estudo de biologia molecular estrutural da enzima enolase de *Plasmodium falciparum*.

MULINARI, Evandro José¹; MALUF, Fernando Vasconcelos¹; GARCIA, Célia Regina da Silva²; GUIDO, Rafael Victório Carvalho¹
evandro.mulinari@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Instituto de Biociências - USP

O projeto de pesquisa abrange uma área extremamente sensível da saúde humana, referindo-se às doenças tropicais que afetam milhões de pessoas no mundo inteiro, especialmente em regiões mais pobres. O *Plasmodium falciparum* é o agente etiológico mais severo da malária, é encontrado em mais de 90 países e é responsável pela morte de mais de 2 milhões de indivíduos a cada ano. (1) O surgimento de casos de resistência aos fármacos disponíveis torna de extrema importância a seleção de novos alvos moleculares e o desenvolvimento de agentes quimioterápicos inovadores contra essa parasitose. (2-3) A via glicolítica do *Plasmodium falciparum* é a única fonte de obtenção de energia. A enolase catalisa a conversão do substrato 2-fosfoglicerato em fosfoenolpiruvato, sendo caracterizada como uma metaloenzima dimérica dependente de íons magnésio e massa molecular de 100 kDa. Os objetivos fundamentais deste projeto de mestrado são a elucidação da estrutura 3D da enolase de *Plasmodium falciparum* (Pf-enolase) e a descoberta de inibidores enzimáticos potentes e seletivos da enzima alvo. O processo de descoberta e planejamento de moléculas bioativas integra estudos em pesquisa básica e aplicada através do emprego de métodos em biologia estrutural e química medicinal. A clonagem da enzima foi realizada com base em uma biblioteca de cDNA de *Plasmodium falciparum*. A sequência do gene codificante para a Pf-enolase foi obtida no banco de dados GenBank (acesso AAN35353.1). Um par de oligonucleotídeos iniciadores foi planejado e sintetizado para amplificação do gene e posterior utilização no sistema de clonagem Clonagem Independente de Ligase (LIC) através da técnica de reação em cadeia da polimerase (PCR). A amplificação do gene foi confirmada por eletroforese em gel de agarose e o produto da reação de amplificação purificado. Em seguida, reagiu-se o fragmento amplificado com a enzima T4 polimerase, na presença de dATP, para formação de extremidades coesivas de ligação ao sistema LIC. O fragmento foi então inserido em vetores de expressão (pETM-11/LIC, pETTrx-1a-LIC e pETNus-1a/LIC) previamente tratados com a enzima T4 polimerase, na presença de dTTP, e as respectivas reações utilizadas para transformar células de *Escherichia coli* DH5 α . A presença do plasmídeo nos clones recombinantes foi avaliada através de PCR de colônia. As colônias positivas foram incubadas em meio líquido e extraído o DNA plasmidial. A análise de sequenciamento confirmou o sucesso das estratégias empregadas na clonagem da enzima Pf-enolase. Com base nesse resultado, o DNA plasmidial foi então utilizado para transformar células de expressão *Escherichia coli* Rosetta. A avaliação inicial de expressão proteica indicou que a melhor condição para expressão da Pf-enolase foi observada na temperatura de 18°C e período de 16 h para as construções pETM11 e pETTrx-1a. Protocolos de purificação padronizados baseados em métodos cromatográficos de alta eficiência encontram-se em desenvolvimento para a obtenção da enzima com elevado teor de pureza. A enzima pura será utilizada nos ensaios de cristalização e difração de raios X para a elucidação da estrutura 3D e nos ensaios cinéticos para identificação de moléculas bioativas como candidatos a novos

compostos líderes para o tratamento da malária.

Palavras-chave: *Plasmodium falciparum*. Enolase. Clonagem e expressão.

Referências:

1 MURRAY, C. J.; ROSENFELD, L. C.; LIM, S. S.; ANDREWS, K. G.; FOREMAN, K. J.; HARING, D.; FULLMAN, N.; NAGHAVI, M.; LOZANO, R.; LOPEZ, A. D. Global malaria mortality between 1980 and 2010: a systematic analysis. **Lancet**, v. 379, n. 9814, p. 413-431, 2012. DOI:10.1016/S0140-6736(12)60034-8.

2 WORLD HEALTH ORGANIZATION - WHO. **Global report on antimalarial efficacy and drug resistance: 2000-2010**. Disponível em: <<http://www.who.int/malaria/publications/atoz/9789241500470/en/>>. Acesso em: 02 ago. 2012.

3 GUIDO, R. V. C.; OLIVA, G.; ANDRICOPULO, A. D. Structure-and ligand-based drug design approaches for neglected tropical diseases. **Pure and Applied Chemistry**, 2012. Disponível em: <<http://pac.iupac.org/publications/pac/pdf/asap/pdf/PAC-CON-11-11-07.pdf>>. Acesso em: 02 ago. 2012.

PG114

Estudo computacional da difusão térmica em proteínas termoestáveis

Computational study of thermal diffusion in thermostable proteins

MUNIZ, Heloisa dos Santos¹; MARTINEZ, Leandro²

heloisadsm@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Instituto de Química - UNICAMP

Mecanismos de difusão de energia vibracional em biomoléculas têm sido relacionadas a função, alosterismo e sinalização intramolecular. (1-3) Neste trabalho nós utilizamos uma metodologia computacional para analisar o fluxo de energia em proteínas. Simulações de Dinâmica Molecular são utilizadas para o estudo de difusão térmica, provendo artifícios nos quais não são possíveis experimentalmente: a proteína é esfriada a baixas temperaturas e apenas um resíduo é aquecido através do acoplamento de um banho térmico. Consequentemente, o calor flui do aminoácido aquecido para a proteína, revelando os caminhos da difusão da energia vibracional. Pelo fato de que proteínas termoestáveis possam ter particulares mecanismos de relaxação, distribuição e dissipação da energia vibracional, elas são sistemas interessantes para serem utilizadas junto a este método. Portanto, um padrão de difusão de calor de uma proteína termofílica pode ser identificado e comparado com outro de uma proteína homóloga mesofílica, em especial, pertencentes à família 11 de Xilanases. O mapa de difusão térmica obtido da proteína no vácuo mostrou diferenças entre xilanases mesofílica e termofílica, e termofílica e hipertermofílica: qualquer que seja o resíduo aquecido, aminoácidos específicos respondem com alta temperatura. Em simulações com duas xilanases homólogas diferindo de 7 mutações e um C-terminal mais longo, somente dois destes aminoácidos mutados não mudaram o padrão do mapa de difusão térmica explicitamente. Simulações em água não resultaram em padrões de difusão diferentes, provavelmente devido ao fluxo de calor para água ser mais rápido que para o resto da proteína. Entretanto, elas evidenciaram as mesmas regiões frias para cinco xilanases da família 11, especialmente a região de ligação do substrato, sugerindo uma possível característica funcional de difusão de calor. Revelando mecanismos anisotrópicos de difusão térmica de proteínas termofílicas, novas abordagens em engenharia racional de proteínas com estabilidade e atividade moduladas podem ser sugeridas.

Palavras-chave: Difusão de energia vibracional. Dinâmica molecular. Estabilidade térmica.

Vibrational energy diffusion in biomolecules have been related to function, allosterism and intramolecular signaling. (1-3) Here we utilize a computational methodology to address energy flow in proteins. Molecular Dynamics simulations are used to do thermal diffusion studies, providing artifices which are not available experimentally: The protein is cooled to very low temperatures and only a residue is heated by coupling it to a thermal bath. Thus, the heat flows from the heated residue to the protein, revealing the diffusional pathways of vibrational energy. Because thermostable proteins may have particular mechanisms of relaxation, distribution and

dissipation of vibrational energy, they are interesting systems which this methodology can be applied. A heat diffusion pattern from a thermophilic protein can be identified and compared to analogous mesophilic protein, in special, from the Family 11 Xylanases. The thermal diffusion map obtained for the protein in vacuum has shown differences between mesophilic and thermophilic, and also thermophilic and hyperthermophilic xylanases: whichever heated residue, some specific amino acids have high thermal responses. In simulations with two homologous xylanases differing just by seven mutations and a longer C-terminus, only two of these mutated amino acids haven't explicitly changed the thermal diffusion map pattern. Simulations in water haven't shown different diffusion patterns, probably due to faster heat flow through water rather than the protein. However, they have evidenced the same cold regions for five family 11 xylanases, specially at substrate-binding regions, suggesting a possible heat-diffusion functional characteristic. By revealing the mechanisms of anisotropic thermal diffusion of thermophilic proteins, new approaches to rational protein engineering with modulated stability and activity can be suggested.

Keywords: Vibrational energy diffusion. Molecular dynamics. Thermal stability.

Referências:

- 1 MARTÍNEZ, L.; FIGUEIRA, A. C. M.; WEBB, P.; POLIKARPOV, I.; MUNIR, S. S. Mapping the intramolecular vibrational energy flow in proteins reveals functionally important residues. **Journal of Physical Chemistry Letters**, v. 2, n. 16, p. 2073-2078, 2011.
- 2 PETITA, C. M.; ZHANG, J.; SAPIENZA, P. J.; FUENTES, E. J.; LEE, A. L. Hidden dynamic allostery in a PDZ domain. **Proceedings of the National Academy of Sciences of United States of America**, v. 106, n. 43, p. 18249-18254, 2009.
- 3 OTA, N.; AGARD, D. A. Intramolecular signaling pathways revealed by modeling anisotropic thermal diffusion. **Journal of Molecular Biology**, v. 351, n. 2, p. 345-354, 2005.

PG115

Estudos estruturais e funcionais de receptores de c-di-GMP transmembranares envolvidos em virulência e formação de biofilmes bacterianos

ROSSETO, Flavio Rodolfo¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹

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. Juntamente com as enzimas responsáveis pela biossíntese de c-di-GMP, um amplo espectro de receptores de c-di-GMP também tem sido identificado. Estes incluem fatores de transcrição, FleQ e VpsT, domínios PilZ, "riboswitches" e domínios GGDEF e EAL degenerados. Nesta última classe encontra-se a proteína LapD de *Pseudomonas fluorescens*, um receptor transmembranar de c-di-GMP essencial para formação de biofilme sob condições de estresse nutricional. LapD é uma proteína transmembranar com um domínio de interação periplasmático (DP), seguido de uma única hélice transmembranar (TM) e domínios HAMP, GGDEF e EAL degenerados na porção citoplasmática. (2) A ligação de c-di-GMP ao domínio degenerado EAL aumenta a afinidade de DP pela protease periplasmática LapG, prevenindo que a adesina LapA seja degradada, o que estabiliza o biofilme. Estudos demonstraram parcialmente o mecanismo de funcionamento de LapD, no entanto uma série de características funcionais sobre essa sub-família de proteínas com arquitetura DP-TM-HAMP-GGDEF-EAL ainda precisam ser elucidadas. (3) Nesse sentido, temos como objetivo principal a determinação estrutural e estudos biofísicos de mudanças conformacionais das proteínas PA14_45930 de *P. aeruginosa* (homólogo de LapD) e STM3615 de *Salmonella enterica*, uma proteína com mesma arquitetura de LapD e provavelmente envolvida em invasão celular e virulência. Utilizando principalmente as técnicas de cristalografia de proteínas e ressonância paramagnética eletrônica pulsada, pretende-se elucidar os mecanismos moleculares dessas proteínas na transdução de sinal envolvida em formação de biofilme e virulência. Dada à ausência de c-di-GMP em eucariotos, as vias de sinalização mediadas por essa molécula representam uma ótima oportunidade para o desenvolvimento de novas terapias contra infecções crônicas, sendo que o estudo proposto nesse projeto aumentará nossa compreensão das bases moleculares controlando virulência e formação de biofilmes bacterianos.

Palavras-chave: c-di-GMP. Biofilme bacteriano . Proteína de membrana.

Referências:

1 ROSS, P.; MAYER, R.; BENZIMAN, M. Cellulose biosynthesis and function in bacteria. **Microbiology Reviews**, v. 55, n. 1, p. 35-58, Mar. 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, Sept. 2006.

PG116

Determinação da estrutura da proteína U5-15K de *Trypanosoma brucei* por ressonância magnética nuclear de alta resolução

NEUBER, Pedro Michelao¹; SILVA, Marco Túlio Alves da¹; THIEMANN, Otavio Henrique¹; MUNTE, Claudia Elisabeth¹
pedro.neuber@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O planejamento de fármacos é atualmente uma das ferramentas mais utilizadas no auxílio ao tratamento e prevenção das mais diversas doenças. A eficácia e a segurança de atuação destes são os dois maiores objetivos procurados pelo processo, e dependem de um alto nível de conhecimento sobre o alvo molecular de um dado organismo e os processos metabólicos do qual participa. Um dos pontos-chave é a especificidade do fármaco em relação ao alvo específico do parasita, e consequente minimização dos efeitos colaterais nocivos ao ser humano. O conhecimento da estrutura proteica de um potencial alvo molecular contribui imensamente para esse estudo, possibilitando um melhor desenvolvimento do fármaco atuante. Diversas doenças parasitárias abrem espaço para essa busca. Tripanossomíases como as doenças de Chagas (causada por *Trypanosoma cruzi*) e do Sono (causada por *Trypanosoma brucei* sp.) sofrem com a falta de um tratamento 100 % eficaz. O fato desses parasitas apresentarem processos bioquímicos altamente conservados entre si, como em particular o processamento translacional dos RNA mensageiros (*trans-splicing*), é relevante, sendo bastante estudado e considerado no combate às doenças.(1) Estudos de análise funcional de uma das proteínas do complexo U5 de tripanossomos (envolvido no processo de *splicing*), a U5-15K, mostram que ela é essencial para a sobrevivência do protozoário.(2) Dessa forma, em contraste com a homóloga humana, pode ser usada como potencial alvo biológico para o planejamento de fármacos no tratamento da Doença do Sono.(3) O foco deste trabalho é, portanto, a determinação da estrutura tridimensional da proteína U5-15K, utilizando a técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de alta resolução. Além da importância para o planejamento de novos fármacos, a estrutura pode servir de base para determinação da estrutura da proteína homóloga de *T. cruzi* e outros protozoários. Estudos prévios realizados apresentaram uma tendência da proteína a ser expressa, quase que em sua totalidade, na forma de fração insolúvel. Após diversas tentativas de reenovelamento a partir de corpos de inclusão, a proteína foi expressa em fusão com a proteína SUMO em *Escherichia coli* BL21(DE3), a partir da subclonagem do gene em vetor pET-SUMO. As bactérias foram cultivadas em meio mínimo enriquecido com ¹³C-glicose e ¹⁵NH₄Cl, durante cerca de 20 horas, a 18° C. A expressão foi induzida em DO₆₀₀ = 1,0 com IPTG 0,5 mM. A purificação da proteína solúvel foi feita por afinidade em coluna de Ni-NTA, em tampão fosfato de potássio 50 mM, NaCl 300 mM, pH 8,0. A clivagem da proteína de fusão foi realizada com sua protease específica. A amostra foi concentrada e dialisada em tampão final (fosfato de potássio 50 mM, NaCl 30 mM, pH 7,0). O estado monomérico e monodisperso da amostra foi confirmado por medidas de espalhamento dinâmico de luz (DLS). Foram realizados experimentos de RMN 2D heteronucleares (¹³C-HSQC, ¹⁵N-HSQC), 3D heteronucleares (HCCH-TOCSY) e de tripla ressonância (HNCA, HNCO, CBCA(CO)NH). Esses espectros estão sendo processados e analisados, e possibilitarão realizar o assinalamento sequencial completo da proteína e a previsão de elementos de estrutura secundária. Experi-

mentos de RMN futuros permitirão a determinação da estrutura tridimensional da proteína.

Palavras-chave: RMN. *Trypanosoma brucei*. U5-15K.

Referências:

- 1 SILVA, M. T. A. **Identificação e caracterização funcional de proteínas específicas do complexo U5 snRNP em tripanosomatídeos**. 2009. Tese (Doutorado em Biotecnologia) - Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Araraquara, 2009.
- 2 SILVA, M. T. A.; AMBROSIO, D. L.; TREVELIN, C. C.; WATANABE, T. F.; LAURE, H. J.; GREENE, L. J.; ROSA, J. C.; CICARELLI, R. M. B. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins . **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v.106, n. 2, p.130-138, 2011. DOI:10.1590/S0074-02762011000200003 .
- 3 ZHANG, Y. Z.; CHENG, H.; GOULD, K. L.; GOLEMIS, E. A.; AND Roder, H. Structure, stability, and function of hDim1 investigated by NMR, circular dichroism, and mutational analysis. **Biochemistry**, v. 42, n. 32, p. 9609-9618, 2003.

PG117

Estudo de interfaces líquido-ar com microscopia de geração de soma de frequência

OITICICA, Pedro Ramon Almeida¹; MIRANDA, Paulo Barbeitas¹

praoitica@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo das propriedades moleculares em interfaces líquido-ar é importante para entender processos dinâmicos e de equilíbrio em reações químicas, sistemas biológicos, em medicina, na ciência em geral e na tecnologia. A espectroscopia vibracional por geração de soma de frequências, desenvolvida por Yuen-Ron Shen e colaboradores em meados dos anos 80(1) constitui uma poderosa ferramenta no estudo de superfícies e interfaces, primeiro por se tratar de um efeito óptico não linear de segunda ordem que só se manifesta em meios materiais não centrossimétricos, segundo por prover informações sobre o espectro vibracional e a orientação de moléculas na interface. Em 1999 Mathias Florsheimer e colaboradores(2) mostraram a possibilidade de acoplar a microscopia óptica com as técnicas espectroscópicas de geração de segundo harmônico e geração de soma de frequência (Microscopia-SFG). Assim é possível obtermos imagens das moléculas na interface com resolução limitada pela difração da luz visível (da ordem de micrometros), mas com contraste químico e informações sobre orientação molecular. Nesse sentido pretendemos montar um microscópio de soma de frequências e utilizá-lo para estudar a interface líquido-ar da solução binária acetonitrila- H_2O em diferentes frações molares de acetonitrila (ACN). As propriedades físico-químicas da superfície de soluções ACN- H_2O tem sido estudadas via espectroscopia vibracional por geração de soma de frequência e simulação computacional(3) mostrando principalmente a existência, em certas frações molares, de aglomerados moleculares de acetonitrila pura e sugerindo interação entre H_2O e ACN do tipo dipolo-dipolo e/ou ligação de hidrogênio. Atualmente a única técnica experimental conhecida capaz de observar diretamente essa organização de aglomerados superficiais nessa solução binária em especial é a microscopia-SFG. A obtenção de imagens de domínios moleculares interfaciais da solução binária ACN- H_2O pode contribuir com os estudos já existentes e demonstrar toda a potencialidade da Microscopia-SFG para a caracterização de interfaces líquidas.

Palavras-chave: Interface. Geração de soma de frequência. Microscopia.

Referências:

- 1 SHEN, Y. R. Surface nonlinear optics invited. **Journal of the Optical Society of America B**, v.28, n.12, p. A56-A66, 2011.
- 2 FLORSHEIMER, M.; BRILLERT, C.; FUCHS, H. Chemical imaging of interfaces by sum-frequency generation. **Materials Science and Engineering C**, v.8 -9, p.335-341, 1999.
- 3 RAO, Y.; TURRO, N. J.; EISENTHAL, K. B. Water structure at air/acetonitrile aqueous solution interfaces. **The Journal of Physical Chemistry C**, v.113, n.32, p.14384-14389, 2009.

PG118

Análise epidemiológica e molecular de *Staphylococcus aureus* resistentes à meticilina (MRSA) isolados de colonização de pacientes HIV positivos de um hospital de Ribeirão Preto

OKADO, Jéssica Baleiro¹; GIR, Elucir²; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha¹
jessiokado@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Enfermagem de Ribeirão Preto - USP

Staphylococcus aureus são cocos gram-positivos patógenos que podem colonizar principalmente narinas, mas também axilas, virilha, trato gastrointestinal, pele e vagina. É um grande causador de infecções cutâneas, simples e severas, além de causar osteomielite, bacteremia, sepse, impetigo, carbúnculo, síndrome do choque tóxico. Essa espécie possui grande potencial de resistência a drogas, sendo de especial importância, linhagens resistentes à meticilina (MRSA) e outros betalactâmicos e o aparecimento recente de níveis de resistência à vancomicina (hVISA, VISA, VRSA), principal droga no tratamento de MRSA. Além destes perfis, são encontrados outros resistentes a várias drogas, sendo importante traçar o perfil de sensibilidade desse organismo. As linhagens de *S. aureus* se tornam resistentes à meticilina devido a presença do gene *mecA*, contido no elemento genético *Staphylococcal cassette chromosome SCCmec*. Atualmente, são conhecidos onze tipos de *SCCmec*, com seus respectivos subtipos. O tipo 4 desse elemento é relacionado na literatura com a produção da toxina Leucocidina Pantón-Valentine (PVL), que pode causar agravamento em infecções causadas pelo patógeno. Além dessa toxina, linhagens de MRSA são capazes de produzir várias toxinas, como alfa-hemolisina, tornando a bactéria mais virulenta. Para se caracterizar e conhecer as linhagens de MRSA presente no ambiente hospitalar ou disseminado entre os pacientes e agentes de saúde, é importante estudar o tipo de *SCCmec* presente e verificar sua clonalidade pela tipagem por eletroforese em campos pulsados (PFGE, do inglês *Pulsed Field Gel Electrophoresis*). Além disso, cada clone detectado deve ser caracterizado quanto ao Tipo de Sequência (ST) através do *Multilocus Sequence Typing* (MLST) para se conhecer as linhagens de MRSA presentes. Este projeto visa o estudo de amostras de MRSA isoladas de pacientes HIV positivos de um hospital de Ribeirão Preto-SP. Os objetivos são: 1. Traçar perfil de sensibilidade a drogas em uso no país (Vancomicina, Teicoplanina, Oxacilina, Linezolida, e Daptomicina) que será realizado através do Etest (AB Biodisk, Solna, Suécia) conforme as instruções do fabricante ou pela microdiluição se a droga estiver disponível; 2. Detectar hVISA por triagem e análise de população. 3. Investigar se essas amostras produzem a toxina PVL.(1) 4. Caracterização de seus elementos *SCCmec* usando técnica de multiplex PCR (2), 5. Tipagem molecular por PFGE seguindo método descrito na literatura (3), e, 6. Tipagem por MLST de cada tipo de PFGE encontrado, sendo possível traçar um perfil evolutivo dessas amostras e comparar com outras já descritas, usando o programa eBURSTv3. Será importante caracterizar molecularmente as amostras de colonização de pacientes HIV positivo, pois devido as condições diferenciadas do sistema imunológico, pouco se sabe há alguma linhagem de MRSA que prevalece nestes indivíduos e há poucos dados na literatura disponíveis.

Palavras-chave: MRSA. *Staphylococcus aureus*. *SCCmec*.

Referências:

- 1 LINA, G.; PIEMONT, Y.; GODAIL-GAMOT, F.; BES, M.; PETER, M.; GAUDUCHON, V.; VANDENESCH, F.; ETIENNE, J. Involvement of Panton-Valentine Leukocidin-producing *Staphylococcus aureus* in primary skin infections and pneumonia. **Clinical Infectious Diseases**, v. 29, n.5, p.1128-32, 1999.
- 2 KONDO, Y.; ITO, T.; MA, X. X.; WATANABE, S.; KERISWIRTH, B. N.; ETIENNE, J.; HIRAMATSU, K. Combination of multiplex PCRs for Staphylococcal cassette chromosome *mec* type assignment: rapid identification system for *mec*, *ccr*, and major differences in Junkyard regions. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 51, n. 1, p. 264-274, 2007.
- 3 TENOVER, F. C.; ARBEIT, R. D.; GOERING, R. V.; MICKELSEN, P. A.; MURRAY, B. E.; PERSING, D. H.; BALA, S. Interpreting chromosomal DNA restriction patterns produced by pulsed-field gel electrophoresis: criteria for bacterial strain typing. **Journal of Clinical Microbiology**, v. 33, n. 9, p. 2233-2239, 1995.

PG119

Ambientes de coordenação em xerogéis fotocrômicos híbridos, estudados por ressonância magnética nuclear de alta resolução

OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de¹; SCHNEIDER, José Fabian¹; RODRIGUES FILHO, Ubirajara Pereira²
mjunior@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Materiais híbridos (ormosils) contendo ácido 12-tungstofosfórico ($H_3PW_{12}O_{40}$, HPW) inserido em uma matriz de siloxanos, apresentam propriedades fotocrômicas (mudança de cor induzida por radiação UV). (1) O ambiente de coordenação dos poliânions $PW_{12}O_{40}^{3-}$ está formado por H de grupos nitrogenados e H_2O . A dinâmica do poliânion, e a estrutura local, são influenciadas pelo grau de hidratação, influenciando a eficiência do efeito fotocrômico. Como o sistema em estudo apresenta alta complexidade, em uma primeira etapa do projeto foram estudadas amostras de $HPW \cdot nH_2O$, $HPW \cdot 6H_2O$ e xerogéis simples (contendo glicidilpropiltrimetoxisilano - GLYMO e tetraetilortosilicato - TEOS), que servirão como modelo para o estudo em xerogéis mais complexos. Diferentes variáveis são consideradas para a análise destas amostras, como método de preparação, tratamentos térmicos e variação de temperatura *in situ*. Estudos de 1H e ^{31}P RMN em $HPW \cdot nH_2O$ revelam um alto grau de mobilidade relativa do poliânion de HPW, impedindo a transferência de polarização $^1H - ^{31}P$. Por outro lado, no $HPW \cdot 6H_2O$, o poliânion apresenta dinâmica mais lenta, possibilitando a realização de experimentos de ressonância dupla. Experimentos de polarização cruzada (CP) $\{^1H\} - ^{31}P$ revelam um baixo grau de acoplamento entre 1H e ^{31}P , como seria esperado, devido às grandes distâncias entre estes núcleos. Experimentos com variação de temperatura revelam poucas alterações no sinal de RMN de ^{31}P , enquanto por outro lado, o ambiente de prótons sofre claras alterações do ponto de vista dinâmico. Quando as amostras passam por tratamento térmico a 150°C, a ausência de grupos de hidratação, assim como alterações nos grupos orgânicos, provocam claras alterações no ambiente ao redor do HPW. Por outro lado, o ambiente químico do HPW também é alterado quando os xerogéis são preparados em atmosfera saturada com N_2 , com 10 a 15% de umidade relativa, mostrando mais uma vez o importante papel da água nestes compostos. O próximo passo deste trabalho é a realização de experimentos de correlação heteronuclear $\{^1H\} - ^{31}P$ e $\{^1H\} - ^{29}Si$, para a devida atribuição das espécies de 1H observadas.

Palavras-chave: HPW. RMN. Fotocromismo.

Referências:

1 OLIVEIRA JUNIOR, M. de ; SOUZA, A. Lopes de ; SCHNEIDER, J.; RODRIGUES FILHO, U. Pereira . Local structure and photochromic response in ormosils containing dodecatungstophosphoric acid. **Chemistry of Materials**, v. 23,n.4, p. 953-963, 2011.

PG120

Controle coerente de geração de luz branca em fibra fotônica

OLIVEIRA, Anderson Roberto de¹; SIQUEIRA, Jonathas de Paula¹; MISOGUTI, Lino¹; ZILIO, Sérgio Carlos¹
anderson.roberto.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos dias de hoje, pulsos mais curtos que 30 femtossegundos podem ser gerados em lasers de Ti:Safira operando no regime de Travamento de modos por efeito Lente Kerr (KLM), um fenômeno não linear de terceira ordem. (1) Além da alta intensidade, esses pulsos apresentam grande largura de banda espectral que permite várias novas aplicações. Através de um Modulador Espacial de Luz (SLM), pode-se modular arbitrariamente a fase de cada componente espectral do pulso laser (geralmente no infravermelho próximo) e, acoplado-o à fibra fotônica (2), controlar e otimizar a geração da luz branca. (3) Esse processo de geração de novas frequências ocorre devido a vários efeitos não lineares, sendo os principais a automodulação de fase e a mistura de quatro ondas. (1) Neste trabalho, apresentamos uma proposta para a geração de luz branca sintonizável com largura de linha estreita. Isso pode ser feito utilizando um algoritmo evolutivo para controlar a fase espectral introduzida nos pulsos de laser pela montagem formatadora. Esperamos que, com isso, a luz gerada possa ser sintonizada dentro da região visível do espectro eletromagnético. Aplicações incluem a utilização como fonte de luz para medidas espectroscópicas.

Palavras-chave: Óptica não linear. Geração de luz branca. Controle coerente.

Referências:

- 1 BOYD, R. W. **Nonlinear optics**. San Diego: Academic Press Inc., 1992.
- 2 AGRAWAL, G. P. Nonlinear fiber optics: its history and recent progress [Invited]. **Journal of the Optical Society of America B** - optical physics, v. 28, n. 12, p. A1-A10, 2011.
- 3 DUDLEY, J.M.; GENTY, G.; COEN, S. Supercontinuum generation in photonic crystal fiber. **Reviews of Modern Physics**, v. 78, n. 4, p. 1135-1184, 2006.

PG121

Sensoriamento de temperatura e deformação por redes de Bragg em fibras ópticas em torno de 800 nm

OLIVEIRA, André Orlandi de¹; MISOGUTI, Lino¹; ZILIO, Sérgio Carlos¹

andre.orlandi.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Recentemente, redes de Bragg em fibras ópticas (FBG, do inglês Fiber Bragg Gratings) têm sido muito utilizadas como sensores de deformações e de temperatura. Com o uso de duas FBGs com comprimentos de onda distintos, o problema da indistinguibilidade entre temperatura e deformação, presente durante medidas realizadas por esse tipo de sensor, tem sido considerado eliminado. (1) Muito embora esta solução tenha apresentado bons resultados, uma de suas desvantagens é a necessidade da aplicação de duas fontes de luz para os diferentes comprimentos de onda. Em virtude disto, uma das propostas deste trabalho é desenvolver um sistema capaz de realizar medidas de temperatura e deformação, simultaneamente, utilizando apenas uma fonte de luz. Pela inscrição de duas redes de Bragg com comprimentos de onda próximos (no caso, 810 e 860 nm) na mesma posição da fibra óptica, é possível distinguir entre respostas do sensor devidas a variações dos dois parâmetro físicos. Com essas alterações e apesar da pequena separação entre os comprimentos de onda das FBGs (cerca de 50 nm), o sistema respondeu precisamente a variações de deformação e temperatura. Portanto, a utilização de apenas uma fonte de luz no sistema é plenamente justificada, reduzindo substancialmente seu custo. Ademais, os CCDs utilizados para o sensoriamento de variações dos comprimentos de ondas de Bragg em torno de 800 nm são menos onerosos do que aqueles tradicionalmente usados em comprimentos de onda de comunicações ópticas (1,55 μm), o que reduz ainda mais o custo do sistema.

Palavras-chave: Sensor de temperatura e deformação. Redes de Bragg. Fibras ópticas.

Referências:

1 XU, M. et al. Discrimination between strain and temperature effects using dual-wavelength fiber grating sensors. **Electronics Letters**, v. 30, n. 13, p. 1085-1087, June 23 1994.

PG122

Equivalência entre modelo exatamente solúvel e Hamiltoniano de Kondo

OLIVEIRA, Flávio Frois de¹; OLIVEIRA, Luiz Nunes de Oliveira¹

ffroisoliveira@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O modelo de Kondo(1), consiste em uma banda de condução de um metal, com elétrons não-interagentes acoplados antiferromagneticamente a uma impureza descrita por um operador $\vec{S}$ de spin 1/2. O modelo é descrito pelo Hamiltoniano $H_K = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + J \vec{S} \cdot \vec{s}_0$, onde $\vec{s}_0$ é o spin do orbital de Wannier centrado no sítio da impureza e $\epsilon_k = v_F(k - k_F)$ é a relação de dispersão do metal, linearizada em torno do nível de Fermi, onde v_F e k_F denotam a velocidade e o momento de Fermi, respectivamente. O Hamiltoniano de Kondo foi desenvolvido na busca para a solução do problema do mínimo da resistividade em baixas temperaturas para metais com impurezas magnéticas, o que ficou conhecido como "Problema de Kondo". Sendo avesso a tratamentos perturbativos foi através de um método numérico desenvolvido por Wilson na década de 1970, Grupo de Renormalização Numérico (GRN) (2), que se obteve a solução para o problema de Kondo. Já na década de 1980 foi apresentada a solução analítica exata para o problema de Kondo. (3) Todavia, para os cálculos de propriedades de excitação e de transporte do modelo deriva ainda são necessários cálculos numéricos, é então de interesse a busca de alternativas analíticas para o Hamiltoniano de Kondo. O projeto aqui apresentado tem como objetivo estudar um Hamiltoniano H_J , que seria dado por $H_J = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + J \vec{S} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \vec{s}_n$, e contém os mesmos ingredientes físicos presentes em H_K porém sendo de análise mais simples, o que permite encontrar então uma solução analítica e essencialmente igual ao H_K nos regimes térmicos de interesse.

Palavras-chave: Hamiltoniano de Kondo. Grupo de Renormalização Numérico(GRN). Impurezas magnéticas.

Referências:

- 1 HEWSON, A. C. **The Kondo problem to heavy fermions**. Cambridge: Cambridge University Press, 1997. (Cambridge studies in magnetism).
- 2 WILSON, K. G. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. **Review of Modern Physics**, v. 47, n. 4, p. 773-840, Oct. 1975.
- 3 TSVELICK, A.M.; WIEGMANN, P. B. Exact results in the theory of magnetic alloys . **Advances in Physics**, v. 32, n. 4, p. 453-713, 1983.

PG123

Estudo da retenção de água em solos utilizando relaxometria por ressonância magnética nuclear

OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo¹; ESTRADA, Ruben Auccaise²; NOVOTNY, Etelvino Henrique²; BALIEIRO, Fabiano de Carvalho²; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; BONAGAMBA, Tito José¹
rsilv@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Solos - Rio de Janeiro

Este trabalho apresenta os resultados obtidos no estudo da retenção de água em solos, obtidos através da relaxometria por ressonância magnética nuclear (RMN) em baixo campo magnético. Essencialmente foi utilizado o experimento de CPMG, para obtenção dos tempos de relaxação transversal, T₂, em função da quantidade de água em três diferentes tipos de solos, e este resultado foi utilizado para estimar a quantidade retida em cada tipo de solo. A extração de água do solo foi efetuada em uma câmara de Richards de extração de água em solos, e, empregou-se a transformada inversa de Laplace, ILT, para obtenção das distribuições dos tempos de relaxação transversal para elaboração das curvas de retenção de água de cada solo. Observou-se diferentes curvas de retenção de água para cada amostra, reflexo das diferentes composições e morfologias e demonstrando a aplicabilidade na caracterização quanto à capacidade de armazenamento de água e também estimar porosidade de cada solo. Este trabalho traz a possibilidade do emprego da RMN de uma maneira mais prática, na obtenção de curvas de retenção e estimativas da quantidade de água de solos.(1-2)

Palavras-chave: Retenção de água em solos. Relaxometria por RMN. CPMG.

Referências:

- 1 CARR, H. Y.; PURCELL, E. M. Effects of diffusion on free precession in nuclear magnetic resonance experiment. **Physical Review**, v.94, n.3, p.630-638,1954.
- 2 MEIBOOM, S.; GILL, D. Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times. **Review of Scientific Instruments**, v.29, n.8, p. 688-691,1958.

PG124

Fases geométricas em ressonância magnética nuclear e ressonância quadrupolar nuclear

ONCEBAY SEGURA, Charlie¹; SOARES-PINTO, Diogo¹

charlieoncebay@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A descoberta da capacidade de processamento da informação superior dos computadores quânticos, comparados com as máquinas de Turing, levou a uma mudança significativa no entendimento dessas máquinas.(1) Para tornar possível a realização das tarefas computacionais é necessário que se construa um conjunto de portas lógicas quânticas tolerantes a falhas. A operação dessas portas depende de uma dinâmica quântica condicionada, na qual um subsistema sofre uma evolução coerente a depender do estado quântico do outro subsistema. Em particular, o subsistema que evolui pode adquirir um deslocamento de fase condicional. Embora usualmente tenha uma origem dinâmica, os deslocamentos de fase também podem ser geométricos. A versão quântica de fases geométricas foi inicialmente estudada por Berry na década de 1980.(2) Para podermos entender este conceito, devemos invocar a mecânica quântica. Sabe-se que um estado quântico ganha uma fase dinâmica quando o sistema evolui sob transformações unitárias que dependem do Hamiltoniano do sistema físico. Berry percebeu e mostrou que, além da fase dinâmica, o estado quântico pode adquirir outra fase, a chamada geométrica ou de Berry, esta fase depende somente da geometria do caminho percorrido durante a evolução e, por isso, é mais resistente a certos tipos de erros. Isso sugere a possibilidade da realização de uma operação quântica intrinsecamente resistente a falhas.(3) No presente projeto, pretendemos estudar as fases geométricas no contexto tanto da Ressonância Magnética Nuclear (RMN) quanto da Ressonância Quadrupolar Nuclear (RQN). Proporemos novos protocolos de processamento da informação quântica baseados nessas fases, pois os mesmos serão naturalmente mais robustos quanto a falhas devido à injeção de ruído através do ambiente de spins nucleares.

Palavras-chave: Fase geometrica. Fase Berry . NMR.

Referências:

- 1 SHOR, P.W. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. **SIAM Review**, v. 41, n.2, p. 303-332, June 1999.
- 2 BERRY, M.V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v.392, n.1802, p. 45-57, Mar. 1984.
- 3 JONES, J.A.; VIEDRAL,V.; EKERT, Artur ; CASAGNOLI, Giuseppe . Geometric quantum computation using nuclear magnetic resonance. **Nature**, v. 403,n. 6772, p. 869-871, Mar.2000.

PG125

Estudo e caracterização da proteína MEG14

ORCIA, Débora¹; DE MARCO, Ricardo¹

debbyorcia@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho estamos caracterizando a proteína MEG14, pertencente a um grupo de proteínas codificadas por genes de *micro exons* (MEGs) do parasita *Schistosoma mansoni*, um dos agentes causadores da esquistossomose. Esta doença atinge cerca de 76 países tropicais e afeta aproximadamente 210 milhões de pessoas no mundo. (1) Devido à capacidade de produção de proteínas variantes pelas MEGs e a verificação que várias proteínas codificadas por estes genes são secretadas, acredita-se que elas façam parte de um mecanismo de escape da resposta do sistema imune do hospedeiro humano. (2) Desta forma, o estudo e caracterização desse grupo de proteínas poderá facilitar o entendimento de processos utilizados pelo parasita para interagir com o sistema imune do hospedeiro. A partir da proteína MEG14 produzida em sistema heterólogo, foram realizados experimentos de dicroísmo circular (CD), o que permitiu a verificação de um espectro bem definido indicando um padrão esperado para proteínas intrinsecamente desordenadas, com um mínimo em 195-198 nm e um pequeno máximo a 180-185nm, com uma estimativa de cerca de 80% de estrutura desordenada. A adição de 25%, 50%, 75% e 100% de TFE (trifluoretanol) causaram mudanças significativas no perfil do espectro, que passou a ter elementos característicos de estrutura de alfa-hélice. A indução de elementos helicoidais na estrutura secundária das proteínas pela incubação com TFE já foi descrita em proteínas intrinsecamente desordenadas e reflete uma tendência à formação de ligações de hidrogênio intramoleculares em meios apolares. Devido ao fato de já ser descrito que proteínas intrinsecamente desestruturadas são capazes de interagir com múltiplos parceiros devido a sua grande flexibilidade (3), a presença de tal tipo de proteína na superfície do parasita abre a possibilidade de que a mesma possa interagir com diversas proteínas do hospedeiro.

Palavras-chave: *Micro-exons. Schistosoma mansoni.* Proteínas intrinsecamente desordenadas.

Referências:

1 STEINMANN, P.; KEISER, J.; BOS, R.; TANNER, M.; UTZINGER, J. Schistosomiasis and water resources development: systematic review, meta-analysis, and estimates of people at risk. **Lancet Infectious Diseases**, v.6, n.7, p.411-425, 2006.

2 DE MARCO, R.; MATHIESON, W.; MANUEL, S.J.; DILLON, G.P.; CURWEN, R.S.; ASHTON, P.D.; IVENS, A.C.; BERRIMAN, M.; VERJOVSKI-ALMEIDA, S.; WILSON, R.A. Protein variation in blood-dwelling schistosome worms generated by differential splicing of micro-exon gene transcripts. **Genome Research** v. 20, n.8, p.1112-21, 2010.

3 DAS, S, MUKHOPADHYAY, D. Intrinsically unstructured proteins and neurodegenerative diseases: conformational promiscuity at its best. **IUBMB Life**, v.63, n.7, p.478-88, July 2011.

PG126

Desenvolvimento e otimização de cavidade laser Raman Q-switched de aplicações oftalmológicas

ORTEGA, Tiago Almeida¹; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹

tiago.almeida@opto.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste projeto é realizar o desenvolvimento de uma cavidade laser Raman Q-switched de estado sólido (Diode Pumped Solid State Laser - DPSSL) para aplicações oftalmológicas. Para tal, uma cavidade óptica será desenvolvida e otimizada quanto aos parâmetros operacionais tais como potência, regime de operação temporal e estabilidade. Durante o período de realização deste trabalho será pesquisada e desenvolvida uma cavidade laser a qual deverá integrar um console laser oftalmológico. (1) A cavidade a ser desenvolvida será de estado sólido bombeada por diodo (DPSSL) operando em regime pulsado da ordem de nano segundos. Uma vez atendida a especificação de projeto a cavidade laser será integrada em um console para a realização de procedimentos cirúrgicos de trabeculoplastia seletiva a laser, uma técnica para o tratamento de glaucoma de ângulo aberto e pigmentar. A trabeculoplastia seletiva a laser (Selective Laser Trabeculoplasty - SLT) consiste basicamente em reduzir a pressão intra-ocular (Intra Ocular Pressure - IOP) através da interação seletiva da radiação laser com células pigmentadas da malha trabecular.

Palavras-chave: Laser. Q-switching. Óptica não linear.

Referências:

1 JAKUTIS-NETO, J.; LIN, J.; WETTER, N. U.; PASK, H. . Continuous-wave watt-level Nd:YLF/KGW Raman laser operating at near-IR, yellow and lime-green wavelengths. **Optics Express**, v. 20, n. 9, p. 9841-9850, 2012.

PG127

Aplicação da transformação wavelet no estúdio de sequências de aminoácidos em uma proteína artificial

PALOMINO SALCEDO, David Leandro¹; COMBARIZA CRUZ, Ernesto²

palomino@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Universidad del Valle

Usando a função Devils Staircase (1) para simular um sinal gerado pelas características físico-químicas (como a hidrofobicidade, o potencial químico, etc) das sequências de aminoácidos de uma proteína. A função Devils Staircase é obtida de a integração do Conjunto de Cantor e em no caso deste trabalho se utiliza a quarta iteração. Uma vez que a proteína artificial é obtida deve ser dividido em intervalos de 512, representando cada posições de aminoácidos e se procede a realizar uma Transformação Wavelet Discreta utilizando a Wavelet Haar (2), que é mais simples de todos as wavelet, e se itera ate sua quinta resolução. Depois com os dados obtidos a partir da transformação se procede a calcular a Dimensão Fractal (1), usando para este os máximos locais que geram uma função de partição para cada resolução. Com estes dados é obtido um conjunto de dimensões fractais o que indica como resultado que este sistema tem características de Multifractalidad (3) e que isto pode indicar que possui características Bioinformáticas.

Palavras-chave: Análise wavelet. Biocomputação. Devil's Staircase.

Referências:

- 1 MALLAT, S. **A wavelet tour of signal processing**. 3rd ed. Burlington: Academic Press, 2009. cap. 6. p 242 - 259.
- 2 WALKER, J. **A primer on wavelets and their scientific applications**. Boca Raton: Chapman & Hall-CRC, 1999. cap. 1.
- 3 SOLER, R.; MANRUBIA, S. **Orden y caos en sistemas complejos**. Cataluña: Ediciones UPC, 1993. cap. 3. p 77 - 116.

PG128

Interação da fototerapia com o estresse mecânico sobre a função osteo-muscular e tratamento da dor

PAOLILLO, Fernanda Rossi¹; CORAZZA, Adalberto Vieira²; PAOLILLO, Alessandra Rossi³; FIORESE, Marcela Senne¹; KURACHI, Cristina¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
fer.nanda.rp@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Odontologia - UNICAMP

³Interunidades Bioengenharia - USP

Com o processo de envelhecimento ocorre o declínio da funcionalidade dos sistemas muscular e ósseo. Ainda, na presença de dor, os movimentos são evitados de maneira consciente ou inconscientemente para proteção, o que resulta no comprometimento gradual do condicionamento físico com perda grave da função muscular. Ainda, a perda de força e massa muscular aumenta o risco de quedas e fraturas ósseas. (1) O objetivo deste estudo foi investigar a ação associada da fototerapia com o estresse mecânico sobre a função osteo-muscular e tratamento da dor. Vários estudos em animais e humanos foram realizados: (i) Ratas ovariectomizadas e não ovariectomizadas realizaram treinamento resistido com e sem LEDterapia (850nm, 100mW e 120J/cm²) no período de 12 semanas e foram realizadas histomorfometria do reto femoral e do fêmur; (ii) Mulheres na pós-menopausa realizaram treinamento aeróbio com e sem LEDterapia (850nm, 100mW e 108 J/cm²) no período de 1 ano e foram avaliadas com o uso do dinamômetro isocinético e da absorptometria de raios-x de dupla emissão; (iii) A dor foi induzida com inoculação de ácido acético no peritônio de camundongos, posteriormente foram aplicados o Laser (780nm, 70mW e 105J/cm²) e/ou Ultra-Som (1MHz, 1W/cm²) e o número de contorções foram contadas no período de 60 minutos. Para análise estatística dos dados foi utilizado o teste de (*Shapiro-Wilk*) para verificar a distribuição dos dados. Quando a distribuição era não-paramétrica utilizou-se o teste de (*Kruskal-Wallis*), quando paramétrica utilizou-se (*ANOVA Two Way*) para análise intragrupo e (*ANOVA One-Way*) para análise intergrupo. Foi utilizado o (*software Statistica for Windows Release 7 (Statsoft Inc, Tulsa, Ok, USA)*). O nível de significância estatística foi de 5%. Quando a LEDterapia foi associada ao exercício com cargas, as ratas ovariectomizadas mostraram biomodulação das citocinas (IL-4, IL-6, IL-10 and TNF), aumento de 10% do volume muscular e redução de 50% da atividade de osteoclastos ($p < 0.05$). As mulheres na pós-menopausa mostraram um aumento de 40% ($p = 0.03$) na potência muscular e manutenção da massa óssea [0.9 ± 0.01 g/cm² ($p \geq 0.05$)] quando a LEDterapia foi associada ao estresse mecânico gerado pelo exercício na esteira. No outro estudo, quando a Laserterapia foi associada ao Ultra-Som foi constatada a redução de 78% ($p = 0.0002$) da dor e no número de contorções abdominais em camundongos. Os resultados das citocinas indicam a modulação do processo inflamatório que pode melhorar a função muscular e consequentemente, a massa óssea. Exercícios de impacto e o treinamento resistido conduzem ao aumento da força muscular e tem demonstrado excelentes resultados preventivos ou curativos sobre a densidade mineral óssea, além de promover efeito piezoelétrico. Paralelamente, a fototerapia pode aumentar a atividade e o número de osteoblastos, bem como, diminuir proporcionalmente osteoclastos, além de aumentar a produção de ATP e a atividade mitótica celular. (2) Em relação à dor, a interação fotoacústica é um importante

agente para tratamento, possivelmente devido à alteração da transmissão sináptica, liberação de opióides que resultam em modulação nociceptiva e relaxamento muscular. (3) Portanto, a fototerapia e o estresse mecânico podem ser potencialmente utilizados sinergicamente em protocolos clínicos.

Palavras-chave: Laser. LEDs. Ultra-som.

Referências:

- 1 PAOLILLO, F. R.; CORAZZA, A. V.; BORGHI-SILVA, A.; PARIZOTTO, N.A.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S . Infrared-LED applied during high-intensity treadmill training improved maximal exercise tolerance in postmenopausal women: a 6-months longitudinal study. **Lasers in Medical Science**. 2012. Disponível em: <<http://www.springerlink.com/content/m307631x61222278/fulltext.pdf>>. Acesso em: 12 ago. 2012.
- 2 PRETEL, H.; LIZARELLI, R. F. Z.; RAMALHO, L.T. O . Effect of low-level laser therapy on bone repair: histological study in rats. **Lasers in Surgery and Medicine**, v. 39, n. 10, p. 788-796, 2007.
- 3 CHOW, R.T.; DAVID, M. A.; ARMATI, P. J . 830 nm laser irradiation induces varicosity formation, reduces mitochondrial membrane potential and blocks fast axonal flow in small and medium diameter rat dorsal root ganglion neurons: implications . **Journal of the Peripheral Nervous System**, v. 12, n. 1, p. 28-39, 2007.

PG129

Aprimoramento das propriedades farmacocinéticas de insumos farmacêuticos anti-helmínticos

PAULA, Karina de¹; ELLENA, Javier Alcides¹

karina_depaula@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Insumos farmacêuticos ativos (IFAs) é o termo utilizado para denominar qualquer substância que apresenta algum tipo de atividade farmacológica. Na sua maioria são administrados na forma de formulações sólidas. (1) A eficácia terapêutica de cada IFA, no entanto, está diretamente relacionada com suas características no estado sólido. Assim cada forma sólida diferente de um dado IFA poderá apresentar diferentes propriedades físico-químicas tais como cor, morfologia, estabilidade, solubilidade e biodisponibilidade. (2) Uma dessas formas sólidas que merece destaque são os cocristais (IFAs cristalizados com outras substâncias sólidas e neutras em condições ambientes, inclusive cristalizados com outros IFAs). (3) Assim, sob essa perspectiva, este projeto de pesquisa tem como objetivo o planejamento, obtenção e caracterização de novas formas sólidas de fármacos amplamente utilizados no tratamento de doenças parasitárias. Este projeto visa assim à aplicação de técnicas de engenharia de cristais para o desenho de cocristais destes insumos farmacêuticos com propriedades farmacocinéticas melhoradas. Uma das principais propriedades alvo para este aprimoramento é a solubilidade. Esta propriedade está fortemente ligada com a biodisponibilidade do fármaco. Assim, a obtenção de uma nova forma sólida de um dado IFA que apresente uma maior solubilidade permitiria, por exemplo, a produção de um medicamento similar, porém que será mais facilmente assimilado pelo sistema apresentando ao mesmo tempo uma importante diminuição dos efeitos colaterais indesejáveis e contribuindo grandemente à redução do custo de fabricação do mesmo. Para este propósito, combinações de fármacos anti-helmínticos, bem como combinações dos mesmos com agentes cocrystalizantes, serão estudados. Após esta etapa, os fármacos obtidos serão analisados em diferentes técnicas de caracterização como microscopia óptica térmica, difração de raios X por monocristal e pó, espectroscopia vibracional no infravermelho e RAMAN, análise termogravimétrica e calorimetria diferencial de varredura. Os fármacos obtidos serão comparados com os dos IFAs de referência, incluindo quando possível análise de solubilidade, dissolução e bioequivalência além de ensaios biológicos.

Palavras-chave: Insumos farmacêuticos ativos. Cocristais. Anti-helmínticos.

Referências:

- 1 DATTA, S.; GRANT, D. J. W. Crystal structures of drugs: advances in determination, prediction and engineering. **Nature Reviews Drug Discovery**, v. 3, n. 1, p. 42-57, Jan. 2004. .
- 2 CLARKE, H. D. et al . Structure-stability relationships in cocrystal hydrates: does the promiscuity of water make crystalline hydrates the nemesis of crystal engineering? . **Crystal Growth & Design**, v. 10, n. 5, p. 2152-2167, May 2010.
- 3 AITIPAMULA, S. et al . Polymorphs, salts, and cocrystals: what's in a name?. **Crystal Growth & Design**, v. 12, n. 5, p. 2147-2152, May 2012.

PG130

Explorando as bases moleculares para a inibição da enzima Cruzaína de *Trypanosoma cruzi*

Insights into the molecular basis for the inhibition of Cruzain from *Trypanosoma cruzi*

PAULI, Ivani¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

ivanipauli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A enzima cruzaína (EC 3.4.22.51), é a principal cisteíno-protease (CP) do *Trypanosoma cruzi*, o agente etiológico da Doença de Chagas. A enzima é codificada por um grande número de genes (mais de 130 na cepa Tul2) e é expressa como uma pré-pró-enzima em diferentes níveis e em estágios distintos da vida do parasita. (1) A cruzaína madura consiste em um motivo catalítico altamente homólogo às catepsinas S e L, um domínio C-terminal, característico das CPs de Tipo I dos tripanossomatídeos e ausente em todas as outras CPs da família C1 descritas até momento. O papel da cruzaína na nutrição, evasão do parasita do sistema imune do hospedeiro e invasão celular é bem conhecido. (2) Devido à sua relevância biológica, esta enzima encontra-se entre os alvos mais importantes para o desenvolvimento de novos candidatos a fármacos contra a doença de Chagas. Neste contexto, o principal objetivo deste trabalho é desenvolver inibidores para a cruzaína aplicando, de forma combinada e integrada, estratégias experimentais e computacionais em química medicinal e planejamento de fármacos. Este é um projeto extremamente importante para o nosso grupo de pesquisa, uma vez que a doença de Chagas é considerada uma doença tropical negligenciada para a qual não há terapia satisfatória disponível. Diversas séries de inibidores da cruzaína já foram identificadas utilizando diferentes abordagens computacionais e química medicinal experimental. Como resultado da utilização destes métodos, além dos tradicionais inibidores peptídicos irreversíveis desenvolvidos para proteases, potentes inibidores não-peptídicos e não-covalentes foram descobertos para a cruzaína. Em um trabalho recente, Ferreira e colaboradores identificaram um promissor inibidor competitivo reversível com um valor de K_i of 2 micro Molar. (3) Uma série de análogos sintéticos deste composto foi planejada, sintetizada e testada in vitro em nosso laboratório afim de estabelecer importantes relações entre estrutura e atividade (SAR) afim de determinar a importância de grupos funcionais para a atividade de inibição da cruzaína. No presente estudo, nós identificamos características moleculares cruciais envolvidas na ligação destes inibidores como uma ferramenta útil para o planejamento de novos inibidores da cruzaína com potência e seletividade aumentadas.

Palavras-chave: Cruzaína. Doença de Chagas. SBDD-LBDD.

The enzyme cruzain (EC 3.4.22.51), the major cysteine proteinase (CP) from *Trypanosoma cruzi*, is the causative agent of American Trypanosomiasis, also known as Chagas disease. The enzyme is encoded by a high number of genes (up to 130 in the Tul2 strain) and is expressed as a pre-pro-enzyme at different levels by distinct parasite stages. (1) Mature cruzain consists of a catalytic moiety with high homology to cathepsins S and L, and a C-

terminal domain, characteristic of Type I CPs of Trypanosomatids, and absent in all other C1 family CPs described so far. Cruzain is known to be involved in parasite's nutrition, immune system evasion and host cellular invasion. (2) Due to its biological relevance, this enzyme is among the more important therapeutic targets for the design of novel drugs candidates against Chagas disease. In this context, the main goal of this work is to develop cruzain inhibitors applying integrated experimental and computational strategies in medicinal chemistry and drug design. This is an extremely important project to our research group, since Chagas disease is considered a tropical neglected disease for which there is no satisfactory therapy. Several series of cruzain inhibitors have been identified by using different computational and experimental medicinal chemistry approaches. As a result of the use of these methods, besides the traditional irreversible peptidic inhibitors developed for proteases, potent non-peptidic and non-covalent inhibitors were discovered for the enzyme cruzain. In a previous work, Ferreira and collaborators identified a promising reversible competitive inhibitor with a K_i value of 2 micro Molar. (3) A series of synthetic analogs of this compound were designed, synthesized and tested in vitro in our laboratory to establish important structure-activity relationships (SAR) in order to determine the importance of functional groups to the activity of the series of inhibitors. In the present study, we have identified crucial molecular features involved in the binding of these inhibitors as an useful tool for the design of new cruzain inhibitors having increased potency and selectivity.

Keywords: Cruzain. Chagas disease. SBDD-LBDD.

Referências:

- 1 EAKIN, A. E.; MILLS, A. A.; HARTH, G.; McKERROW, J. H.; CRAIK, C. S. The sequence, organization, and expression of the major cysteine protease (cruzain) from *Trypanosoma cruzi*. **Journal of Biological Chemistry**, v. 267, n.11, p. 7411-7420, 1992.
- 2 APARICIO, I. M.; SCHARFSTEIN, J.; LIMA, A. A new cruzipain-mediated pathway of human cell invasion by *Trypanosoma cruzi* requires trypomastigote membranes. **Infection and Immunity**, v. 72, n.10, p. 5892-5902, 2004.
- 3 FERREIRA, R. S.; SIMEONOV, A.; JADHAV, A.; EIDAM, O.; MOTT, B. T.; KEISER, M. J.; McKERROW, J. H.; MALONEY, D. J.; IRWIN, J. J.; SHOICHET, B. K. 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.

PG131

Absorção cooperativa de dois fótons em uma amostra de átomos frios de sódio

PEDROZO-PENAFIEL, Edwin¹; PAIVA, Rafael Rothganger de¹; VIVANCO, Franklin Adán Julca¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; FARIAS, Kilvia Mayre¹

edwin@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A absorção cooperativa de dois fótons é bem conhecida na física do estado sólido. (1) Estes efeitos não lineares em átomos frios, podem permitir investigações no processo de interação destes átomos em amostras degeneradas clássicas ou quânticas, o qual não tem sido profundamente investigado nesse tipo de sistemas. Aqui, a ausência de movimento e parte da interação de longo alcance garante os ingredientes necessários para a absorção cooperativa de dois fótons, fazendo este tipo de amostras adequadas para o estudo de transições cooperativas perto da ressonância. Neste trabalho, demonstramos pela primeira vez a ocorrência deste efeito no regime de baixas temperaturas e baixas densidades. (2) O experimento começa com dois átomos de Na colidindo no estado fundamental, $3^2S_{1/2}$. Dois fótons de um laser intenso com frequência ω são absorvidos por um par de átomos, produzindo a excitação de ambos, deixando um átomo no estado $3^2P_{1/2}$ e outro no estado $3^2P_{3/2}$. Esta absorção é possível só quando a condição $2\omega = \omega_{S \rightarrow P_{1/2}} + \omega_{S \rightarrow P_{3/2}}$ entre a frequência do laser e as frequências de transição atômica é satisfeita, onde $\omega_{S \rightarrow P_{1/2}}$ representa a frequência de transição do estado $3^2S_{1/2}$ para o estado $3^2P_{1/2}$ e $\omega_{S \rightarrow P_{3/2}}$ a frequência de transição do estado $3^2S_{1/2}$ para o estado $3^2P_{3/2}$. Esta excitação é observada por fotoionização usando uma fonte de luz externa, ou seja, para comprovar que realmente houve uma excitação por absorção cooperativa de dois fótons, ionizamos os átomos a partir do estado $3^2P_{1/2}$ e contamos os íons produzidos nesse processo. Para entender as características básicas dos resultados experimentais observados, usamos um modelo simples que considera somente a interação dipolo-dipolo entre os átomos. Para demonstrar experimentalmente a absorção cooperativa, temos usado uma armadilha magneto-óptica contendo átomos de sódio a uma temperatura de aproximadamente $240 \mu K$. (3) Os átomos de sódio são carregados na câmara principal, onde o experimento é realizado, a partir de um forno onde são esquentados a uma temperatura de $550 K$ gerando um feixe atômico. Este feixe é desacelerado usando a técnica de desaceleração Zeeman em configuração spin-flip. Quando os átomos encontram-se na câmara principal dois laser de corantes e um laser de estado sólido produzem todas as frequências requeridas para o experimento, ou seja, desaceleração, armadilhamento, rebombeio e excitação. Para a fotoionização usamos um laser de diodo emitindo num comprimento de onda de $405 nm$. Ambos os átomos excitados estão correlacionados, assim como os fótons gerados no decaimento destes. Isto poderia ter interessantes aplicações, como por exemplo, ser uma forma de geração de estados emaranhados entre átomos excitados, além da produção de fótons correlacionados com frequências diferentes. Estes efeitos poderiam ter interessantes aplicações no futuro. Em geral o tema de não linearidades em átomos frios colidindo tem potencial para muitas aplicações, e a primeira demonstração pode estimular investigações adicionais. Atualmente estamos desenvolvendo um condensado de Bose-Einstein de sódio, onde além de outros estudos, tentaremos reproduzir os resultados obtidos na armadilha magneto-óptica, com isto procuramos verificar a dependência da absorção cooperativa com a densidade atômica.

Palavras-chave: Absorção cooperativa. Dois fótons. Átomos frios.

Referências:

- 1 RIOS LEITE, J. R.; DE ARAUJO, C. B. Lineshape of cooperative two-photon absorption by atom pairs in solids. **Chemical Physics Letters**, v. 73, n. 1, p. 71-74, 1980.
- 2 PEDROZO-PENAFIEL, E. et al. Two photon cooperative absorption in colliding cold Na atoms. **Physical Review Letters**, v. 108, p. 253004-1-253004-4, 2012. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.253004.
- 3 PAIVA, R. R. et al. Photoassociative ionization of cold Na atoms: repulsive levels effects on the ion production rate. **Laser Physics Letters**, v. 6, n. 2, p. 163-167, 2009.

PG132**Expressão heteróloga e caracterização da Endoglucanase I de *Trichoderma harzianum* em *Aspergillus niger***

PELLEGRINI, Vanessa de Oliveira Arnoldi¹; SILVA, Flávio Henrique²; POLIKARPOV, Igor¹
varnoldi@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Genética - UFSCar

O aumento populacional, acompanhado do desenvolvimento socioeconômico, fez com que o consumo energético crescesse exponencialmente. Consequentemente, um dos maiores desafios enfrentados pela sociedade atualmente é uma crise energética e indisponibilidade de atender às demandas mundiais. (1) A preocupação ambiental associada ao esgotamento das fontes de combustíveis fósseis fez com que aumentasse gradativamente o interesse pelos biocombustíveis. As chamadas tecnologias verdes podem ser a solução para esse problema alarmante, tendo como destaque os biocombustíveis, em especial o etanol. (2) O bagaço de cana-de-açúcar é um dos mais abundantes subprodutos derivados da indústria sucroalcooleira, remanescente do processo de obtenção do caldo de cana para produção de açúcar e álcool. (3) Atualmente, os estudos estão voltados para o bagaço de cana focando na sua utilização como matéria-prima para a produção de biocombustíveis, em especial o etanol. O bioetanol ou etanol de segunda geração, tem como base a biomassa celulósica ou, mais rigorosamente, lignocelulósica. Portanto, a conversão de grande quantidade de lignocelulose em açúcar fermentável tem aplicação potencial na área de geração de bioenergia contudo, para que seja possível a utilização da biomassa é necessária a degradação das moléculas da parede celular a açúcares fermentescíveis. A hidrólise enzimática da celulose envolve um complexo arranjo das enzimas chamadas celulasas, que são formadas por três componentes principais: as exoglucanases, as endoglucanases onde se encaixa nossa enzima de estudo e as beta-glicosidases. As endoglucanases agem de forma aleatória ao longo da cadeia e produzem novos sítios para ação das exoglucanases. Assim, o objetivo desse projeto é a produção da endoglucanase I inteira e domínio catalítico de fungo *Trichoderma harzianum* bem como caracterização bioquímica, biofísica e estrutural da mesma.

Palavras-chave: Celulase. Etanol de segunda geração. Expressão heteróloga.

Referências:

- 1 GOLDEMBERG, J. Ethanol for a sustainable energy future. **Science**, v. 315, n. 5813, p. 808-810, 2007.
- 2 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, set. 2008.
- 3 BOCCHINI, D. A.; OLIVEIRA, O. M. M. F.; GOMES, E.; SILVA, R. Use of sugarcane bagasse and grass hydrolysates as carbon sources for xylanase production by *Bacillus circulans* D1 in submerged fermentation. **Process Biochemistry**, v. 40, n. 12, p. 3653-3659, 2005.

PG133

Zitterbewegung em átomos frios

Zitterbewegung in cold atoms

PENTEADO, Poliana Heiffig¹; EGUES, José Carlos¹

poliana@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Em sistemas de matéria condensada, o acoplamento entre os graus de liberdade espacial e de spin através da interação spin órbita oferece a possibilidade de manipular o spin do elétron via seu movimento orbital. A proposta de Datta e Das de um “transistor de spin”, por exemplo, destaca o uso da interação spin órbita para controlar a rotação dos elétrons via um campo elétrico. Recentemente, arranjos de lasers cruzados e campos magnéticos tem sido usados para aprisionar e resfriar átomos em redes ópticas e também para criar potenciais induzidos por luz (1), que mimizam as interações spin órbita em sólidos reais, por exemplo, as de Rashba e Dresselhaus. Neste trabalho, investigamos Zitterbewegung em átomos frios utilizando o Hamiltoniano spin órbita recentemente derivado por Sau et al.(2) “Cross dressed atoms” como spins efetivos podem proporcionar um ambiente adequado para se observar este efeito, já que o intervalo de parâmetros relevantes da intensidade da interação spin órbita pode ser mais facilmente atingível neste contexto. Encontramos uma variedade de órbitas Zitterbewegung peculiares nos espaços real e de pseudospin, por exemplo, ciclóides e elipses, todas as quais obtidas com parâmetros realistas. Átomos frios também podem ser interessantes para se explorar a possibilidade de realizar-se outros tipos de interação spin órbita efetivas em sólidos, por exemplo, o acoplamento intersubbanda recentemente proposto por Bernardes et al.(3) Este trabalho é apoiado pela FAPESP, CAPES e CNPq.

Palavras-chave: Átomos frios. Interação spin órbita. Zitterbewegung.

In condensed matter systems, the coupling between spatial and spin degrees of freedom through the spin-orbit interaction offers the possibility of manipulating the electron spin via its orbital motion. The proposal by Datta and Das of a “spin transistor” for example, highlights the use of the spin-orbit interaction to control the electron spin via electrical means. Recently, arrangements of crossed lasers and magnetic fields have been used to trap and cool atoms in optical lattices and also to create light-induced gauge potentials (1), which mimic the spin-orbit interactions in real solids, e.g., those of Rashba and Dresselhaus. In this work, we investigate the Zitterbewegung – i.e., the trembling motion of electronic wave packets due to the spin-orbit interaction – in cold atoms by starting from the effective spin-orbit Hamiltonian recently derived by Sau et al.(2) Cross-dressed atoms as effective spins can provide a proper setting in which to observe this effect, as the relevant parameter range of spin-orbit strengths may be more easily attainable in this context. Interestingly, we find a variety of peculiar Zitterbewegung orbits in real and pseudo-spin spaces, e.g., cycloids and ellipses – all of which obtained with realistic parameters. Cold atoms may also be useful in exploiting the possibility of realizing other effective spin-orbit interactions in solids, e.g., the intersubband spin-orbit coupling recently proposed by Bernardes et al.(3) This work is supported by FAPESP, CAPES

and CNPq.

Keywords: Cold atoms. Spin-orbit interaction. Zitterbewegung.

Referências:

- 1 LIN, Y. J.; JIMÉNEZ-GARCÍA, K.; SPIELMAN, I. B. Spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates. **Nature**, v. 471, n. 7336, p. 83-86, 2011.
- 2 SAU, J. D.; SENSARMA, R.; POWELL, S.; SPIELMAN, I. B.; SARMA, S. D. Chiral Rashba spin textures in ultracold Fermi gases. **Physical Review B**, v. 83, n. 14, 140510-1-140510-4, 2011.
- 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, 076603-1-076603-4, 2007.

PG134

Transição de fase no modelo de Axelrod unidimensional

PERES, Lucas Vieira Guerreiro Rodrigues¹; FONTANARI, José Fernando¹

lucas.v.rodrigues@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Processos estocásticos baseados em agentes, do inglês Agent-Based Models (ABMs), é uma classe de algoritmos que simula interações entre indivíduos e seu meio ambiente, fornecendo uma alternativa elegante para o entendimento de problemas em matemática descritiva. Atualmente, ABMs provém resultados na previsão de formação de grupos, disseminação de doenças, comportamento social, etc. Temos como exemplo de ABMs o Modelo de Axelrod (1) e a simulação da manutenção da diversidade cultural. O objetivo deste ensaio é caracterizar a transição de fase deste modelo, no entanto, não usaremos uma rede quadrada como topologia do sistema, e sim uma cadeia. Esta mudança na dimensão diminui o tempo médio das simulações não alterando as características do sistema.(2) Duas formas de caracterizações são proposta, uma utilizando os parâmetros discretos e uma transformando um parâmetro q em uma variável contínua, através da distribuição de Poisson. Um diagrama de fase foi obtido para este sistema, mostrando uma discrepância dos resultados de campo médio. Além disto uma análise das condições de contorno mostra invariância qualitativa dos resultados em função desta, como era assumido previamente.

Palavras-chave: Sistemas dinâmicos. Mecânica estatística. Modelagem estocástica.

Referências:

1 AXELROD, R. The dissemination of culture. **Journal of Conflict Resolution**, v. 41, n. 2, p. 203-226, 1997. .

2 VILONE, D. et al. **Ordering phase transition in the one-dimensional Axelrod model**. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0210413.pdf>>. Acesso em: 10 ago. 2012.

PG135

Sincronização explosiva em redes complexas na presença de atrasos temporais

PERON, Thomas Kauê Dal Maso¹; RODRIGUES, Francisco Aparecido²

thomaskaue@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Processos de sincronização são observados em uma imensa quantidade de sistemas físicos, biológicos, químicos, tecnológicos e sociais. Tais sistemas podem ser descritos e modelados através de redes complexas, de forma que o completo entendimento da emergência do comportamento coletivo nestes sistemas complexos só será alcançada por teorias que englobam a interação entre seus elementos, que são acoplados por estruturas heterogêneas e não-triviais. Neste trabalho, estudamos a emergência de transições de fase descontínuas na sincronização de osciladores de Kuramoto acoplados em redes complexas, observadas devido à correlação microscópica entre topologia e dinâmica. Mais precisamente, utilizando teorias de campo médio, obtemos a expressão analítica do acoplamento crítico necessário para a observação de sincronização explosiva em redes livre-escala. Além disso, estudamos o comportamento de tais transições na presença de atrasos temporais, verificando que, ao contrário da noção intuitiva, é possível elevar o grau de sincronismo dos osciladores quando a interação se dá de forma não-instantânea.

Palavras-chave: Sincronização. Redes complexas. Transições de fase.

Referências:

- 1 PERON, T. K. D. M.; RODRIGUES, F. A. Explosive synchronization enhanced by time-delayed coupling. **Physical Review E**, v. 86, n. 1, p. 016102-1-016012-5, 2012.
- 2 GOMEZ-GARDENES, J.; GOMEZ, S.; ARENAS, A.; MORENO, Y. Explosive synchronization transitions in scale-free networks. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 12, p. 128701-1-128701-4, 2011.
- 3 EARL, M. G.; STROGATZ, S. H. Synchronization in oscillator networks with delayed coupling: a stability criterion. **Physical Review E**, v. 67, n. 3, p. 036204-1-036204-4, 2003.

PG136

Estudo da influência de elementos transponíveis no processo evolutivo da multicelularidade de *Volvox carteri*

PHILIPPSEN, Gisele Strieder¹; DE MARCO, Ricardo¹

gistrieder@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Estudos envolvendo transposons indicam que os mesmos desempenham um importante papel na dinâmica da evolução das espécies. (1) Tal fato deve-se à capacidade de transposição destes elementos, fenômeno que pode originar modificações nos padrões estruturais ou regulatórios do genoma hospedeiro. Neste contexto, o principal intuito deste trabalho reside na investigação acerca da influência da atividade de elementos transponíveis no processo evolutivo que conduziu à multicelularidade verificada em *Volvox carteri*. Para tanto, propõe-se utilizar como modelos os genomas dos organismos *Volvox carteri* e *Chlamydomonas reinhardtii*. (2) A primeira etapa da análise foi dirigida à definição das famílias de elementos transponíveis a partir de elementos já descritos e ao mapeamento das inserções correspondentes às mesmas em cada um dos genomas. Esta análise permitiu a verificação da distribuição de frequências de ocorrência das famílias, indicando a L1-3 como a de maior ocorrência no genoma de *Chlamydomonas* e a RTE-5 no de *Volvox*, ambas famílias retrotransposons pertencentes à classe non-LTR (non-Long Terminal Repeat). Verificou-se também que aproximadamente 5,86% do genoma de *Chlamydomonas* é constituído por sequências derivadas de elementos transponíveis, enquanto em *Volvox* este índice atinge 6,13%. Dentre as perspectivas futuras para este trabalho aponta-se o estudo da distribuição de inserções nas diversas classes de genes, a fim de verificar se existe alguma tendência de maior ou menor frequência de insertos em genes de determinada classe funcional. Para realizar a classificação dos genes quanto à funcionalidade será utilizada a ferramenta para anotação Blast2GO (3), que baseia-se no banco de dados do Consórcio Gene Ontology (GO) para gerar a descrição dos produtos gênicos. Por meio desta análise pretende-se investigar se existe um padrão diferenciado de ocorrência de inserções de transposons entre as duas espécies.

Palavras-chave: Transposons. *Volvox carteri*. *Chlamydomonas reinhardtii*.

Referências:

- 1 FESCHOTTE, C. Transposable elements and the evolution of regulatory networks. **Nature Reviews Genetics**, v. 9, n. 5, p. 397-405, 2008.
- 2 PROCHNIK, S. E. et al. Genomic analysis of organismal complexity in the multicellular green alga *Volvox carteri*. **Science**, v. 329, n. 5988, p.223-226, 2010.
- 3 CONESA, A. et al. Blast2GO: a universal tool for annotation, visualization and analysis in functional genomics research. **Bioinformatics**, v. 21, n. 18, p. 3674-3676, 2005.

PG137**Estrutura eletrônica de sistemas hexagonais via o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$** PIRES, Diego Paiva¹; BERNARDES, Esmerindo de Sousa¹

diegopaiva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Dentre as diversas técnicas utilizadas para determinar a estrutura eletrônica de materiais semicondutores, o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se destaca não apenas por fornecer resultados analíticos que requerem um pequeno número de parâmetros experimentais, mas também permitir uma série de aproximações devidamente planejadas. (1) Neste contexto, dada a equação de Schrödinger associada a um elétron na presença do potencial periódico de uma estrutura semicondutora, sujeito ainda a um acoplamento spin-órbita, ao reescrevê-la para a parte periódica da função de Bloch esta apresenta um termo proporcional ao produto escalar que atribui o nome ao método. Este, por sua vez, consiste na projeção desta nova hamiltoniana na base de autoestados que diagonaliza a matriz da interação spin-órbita num ponto da rede previamente escolhido. Conhecendo os acoplamentos permitidos entre as bandas de condução e valência através da teoria dos grupos, escrevemos esta matriz em sua forma mais geral, cuja diagonalização exata fornece uma base de 8 autoestados que apresenta um comportamento universal frente a descrição dos sistemas hexagonal e cúbico, resultado que pode se mostrar muito útil no estudo de politipismos. A representação do hamiltoniano nesta base é conhecida por matriz de Kane 8×8 . Em resultados recentes abordando o modelo de Kane para sistemas cúbicos, particularmente redes zinblende (2-3), hamiltonianos efetivos são calculados por meio do procedimento conhecido como Folding Down (2-3), seguido de um processo de linearização até segunda ordem no inverso do gap de energia com a devida correção na normalização do espinor da banda de condução. (3) Motivados por estes trabalhos e utilizando a matriz de Kane obtida anteriormente, construímos hamiltonianos efetivos para a subbanda de condução em materiais de estrutura hexagonal, em particular wurtzita. Destacamos a interação "spin-órbita" na forma de um operador helicidade e a presença de massas efetivas dependentes de spin no hamiltoniano efetivo já em primeira ordem de aproximação, algo não observado em sistemas cúbicos. Notamos ainda que a rede wurtzita pode apresentar os ordenamentos normal ou anômalo, recobrando as energias observadas na estrutura zinblende pelo simples ajuste de alguns parâmetros do modelo (aproximação cúbica). Considerando uma monoestrutura, diagonalizamos completamente o hamiltoniano efetivo em primeira ordem de aproximação para a banda de condução, resultado que concorda numericamente com a estrutura de bandas obtida da diagonalização semi-analítica da matriz de Kane neste regime. Concluindo o projeto, estamos estudando o acoplamento spin-órbita em heteroestruturas semicondutoras utilizando os hamiltonianos efetivos que dispomos em primeira ordem de aproximação no inverso do gap de energia, calculando ainda transições ópticas induzidas por campos magnéticos externos. Como perspectivas para outros trabalhos, esperamos estender este modelo para os demais pontos de simetria da cela unitária, em especial o ponto K , cuja estrutura eletrônica se correlaciona de forma direta àquela de materiais como o grafeno, além de analisar possíveis efeitos de strain na estrutura de bandas.

Palavras-chave: Spintrônica. Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Semicondutores.

Referências:

- 1 ENDERLEIN, R.; HORING, N. J. M. **Fundamentals of semiconductor physics and devices**. New Jersey: World Scientific, 1997.
- 2 CALSAVERINI, R. S. P. A. **Acoplamento spin-órbita inter-subbanda em heteroestruturas semicondutoras**. 2007. 97 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.
- 3 MOSQUEIRO, T. S. **Transições ópticas em heteroestruturas semicondutoras zincblende com duas subbandas**. 2011. 160 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

PG138

Desenvolvimento de API e IDE para ressonância magnética

PIZETTA, Daniel Cosmo¹; LOURENÇO, Gustavo Vilaça¹; DA SILVA, Danilo Mendes Delfino¹; FREIRE, Guilherme¹; COELHO, Felipe Bessa¹; MARTINS, Mateus José¹; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; TANNÚS, Alberto¹
daniel.pizetta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho serão discutidas as novas ferramentas para a construção Espectrômetro de Ressonância Magnética (RM) totalmente digital, em sua forma mais complexa, um Tomógrafo Digital de RM (TDRM - Projeto ToRM-15). A motivação para este trabalho é devida à questão desta tecnologia no Brasil ser tão pouco desenvolvida, sendo considerada de alto valor agregado podendo, com isto, reduzir os custos de compra e manutenção destes equipamentos.(1) Em particular trataremos o desenvolvimento de uma *API* (*Application Programming Interface*) que constitui a representação em *software* do equipamento e suas funcionalidades e de um *IDE* (*Integrated Development Environment*) para criação e gerenciamento das metodologias (sequências de pulsos) de forma funcional, amigável e independente de *softwares* e *hardwares* comerciais. Tais *softwares* se limitam ao conjunto de sequências pré-existentis ou à extrema complicação na configuração de novas sequências tendo, por vezes, a necessidade de serem executadas por especialistas da própria empresa que as gerou. A estrutura é inspirada nos *softwares* DAMARIS (*DArmstadt MAGnetic Resonance Instrument Software*) e ODIN (*Object-oriented Development Interface for NMR*), porém divergentes pela possibilidade de serem usados tanto para Imagens (RMI) quanto para Espectroscopia e possuir edição gráfica de sequências.(2,3) Comporta, também, alta complexidade de validação e inter-relação entre parâmetros e separa a fase de desenvolvimento das sequências da fase de execução, aquisição e processamento do sinal, itens altamente importantes para uma fácil estruturação e adequação à modularização dos procedimentos.No desenvolvimento do *software* que constitui o *IDE* e a *API*, utilizamos como base a linguagem Python integrada com a *framework* Qt através da ferramenta PySide, por serem multiplataforma. Todas as ferramentas utilizadas, além de outras que fazem parte do projeto, possuem licença de *software* livre e alta confiabilidade, pois são vastamente utilizadas e mantidas pela comunidade científica. O sistema utiliza também técnicas de engenharia, teste e validação de *software*, interface humano-computador e programação orientada a objetos para gerar um código portátil, reaproveitável, escalável, versátil e de fácil interação com os diferentes tipos de usuários. Para a validação do sistema foi montada uma metodologia conhecida como *Spin Echo Multiple Slices*, que ainda neste momento, foi produzida por edição textual através do *IDE*. Com o projeto espera-se conseguir sequências de grande valia para a melhoria na eficiência e qualidade. Os testes preliminares foram realizados no Espectrômetro Digital, com tecnologia totalmente desenvolvida pelo grupo, de modo a validar o projeto. Os resultados já mostram sua capacidade de gerar sequências de pulsos para RMI.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Sequência de pulsos. Ambiente de desenvolvimento de software.

Referências:

- 1 ANDRADE, E. I. G. et al. Analise da evolução do conhecimento e da difusão e incorporação da tecnologia de ressonância magnética no Brasil. In: BRASIL. Ministério da Saúde. Secretaria de Ciência, Tecnologia e Insumos Estratégicos. **Avaliação de tecnologias em saúde:** seleção de estudos apoiados pelo Decit. Brasília: 2011. p.23. (Serie F: Comunicação e Educação em Saúde).
- 2 GÄDKE, A.; ROSENSTIHL, M.; SCHMITT, C; STORK, H.; NESTLE, N. DAMARIS - a flexible and open software platform for NMR spectrometer control. **Diffusion Fundamentals Online Journal**, v. 5, n. 1, p. 1-9, 2007.
- 3 JOCHIMSEN, T.H.; VON MENGERSHAUSEN, M. ODIN - object-oriented development interface for NMR. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 170, n. 1, p. 67-78, 2004.

PG139

Estudos estruturais da celobiohidrolase I de *trichoderma harzianum* IOC 3844

COLUSSI, Francieli¹; POLIKARPOV, Igor¹

francolussi@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O fungo *T. harzianum* apresenta potencial atividade celulolítica, contudo, pouco se sabe sobre a composição molecular do complexo celulolítico do fungo, nem quantas enzimas fazem parte do complexo, tão pouco suas características moleculares. Com o objetivo de contribuir para a biotecnologia, a caracterização de novas e relevantes enzimas celulolíticas estão sendo feitas, neste trabalho relatamos a estrutura de cristalografia, do domínio catalítico da ThCBHI a partir do fungo filamentoso *Trichoderma harzianum* IOC 3844. Os nossos estudos estruturais e simulações de dinâmica molecular mostram que a flexibilidade do Tyr260, em comparação com o Tyr247 a partir do homólogo *T. reesei* Cel7A, é melhorada devido às cadeias laterais curtas de Val216 adjacente e Ala384 resíduos e cria uma diferença adicional na face lateral do túnel catalítico. ThCBHI também tem um laço encurtado na entrada do túnel de celulose de ligação, que foi descrito, para interagir com o substrato em TrCBHI. Estas características estruturais podem explicar por que a enzima de *T. harzianum* apresenta valor superior k_{cat} e inibição menor do produto em comparação com TrCBHI.

Palavras-chave: Celulase. Hidrólise enzimática. Biomassa.

Referências:

1 LYND, L. R.; WIEIMER, P. J.; VAN ZYL, W. H.; PRETORIUS, I. S. Microbial cellulose utilization: fundamentals and biotechnology. **Microbiology and Molecular Biology Reviews**, v. 66, n. 3, p. 506-577, 2002.

PG140

Computação quântica em RQN

POLLI, Roberson Saraiva¹; OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo¹; BONAGAMBA, Tito José¹

roberson@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) tem sido bastante utilizada em estudos de Computação Quântica (CQ) principalmente devido a sua grande habilidade em controlar a dinâmica dos spins através de pulso de radiofrequência (RF). Embora sejam mais comuns sistemas com spin $\frac{1}{2}$, pode-se utilizar sistemas com spins maiores que $\frac{1}{2}$, através da interação quadrupolar. (1) Quando esta interação é dominante, a técnica é denominada Ressonância Quadrupolar Nuclear (RQN). (2) No trabalho proposto, utilizaremos de dois métodos para a obtenção dos qbits: 1) um campo magnético externo de baixa intensidade que age como perturbação para acessar os níveis de energia através de pulsos linearmente polarizados com uma bobina do tipo solenóide; 2) uso de pulsos circularmente polarizados através de duas bobinas cruzadas. (3) A utilização de pulsos circularmente polarizados proporciona à RQN um mecanismo de excitação seletiva não existente na RMN de alto campo; esses pulsos seletivos não exigem os longos tempos de duração normalmente necessários aos pulsos típicos da RMN, o que acarreta uma vantagem em termos de tempo computacional, principalmente considerando a existência de efeitos de decoerência. A principal desvantagem do uso destes tipos de pulsos se refere à dificuldade instrumental em se obter bobinas cruzadas. Desta forma, serão discutidas as diferenças tanto de ordem teórica, quanto de ordem instrumental entre estes dois métodos, bem como alguns resultados preliminares.

Palavras-chave: Ressonância quadrupolar nuclear. Computação quântica. Instrumentação.

Referências:

- 1 TELES, J. et al. Quantum state tomography for quadrupolar nuclei using global rotations of the spin system. **Journal of Chemical Physics**, v.126, n.15, p. 154506, 2007 .
- 2 BAIN, A.; KHASAWNEH, M. From NQR to NMR: the complete range of quadrupole interactions. **Concepts in Magnetic Resonance**, v.22A, n.2, p.69-78. 2004.
- 3 POSSA, D. et al. Numerical simulation of NQR/NMR: applications in quantum computing. **Journal Magnetic Resonance**, v.209, n.2, p.250-260. 2011.

PG141

Termodinâmica de gases ultra-frios em armadilhas harmônicas

POVEDA-CUEVAS, Freddy Jackson¹; CASTILHO, Patrícia Christina Marques¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
jacksonpc@usp.br

¹Instituto de Física São Carlos - USP

Termodinâmica de sistemas que dependem da posição, isto é sistemas não-homogêneos, tem sido objeto da atenção na área de gases ultra-frios. Nestes sistemas a dependência espacial devido ao potencial confinante (armadilha), requer de um novo conjunto de variáveis globais adequadamente bem definidas, que representem as propriedades termodinâmicas de maneira efetiva. Romero-Rochín (1) demonstrou que um gás confinado em um potencial harmônico, a pressão e o volume podem ser formalmente substituídos por novas variáveis análogas às usuais, conhecidas como parâmetros de pressão e volume. O parâmetro de volume é uma função das frequências do potencial de confinamento, e pode ser mostrado que é uma quantidade extensiva. O parâmetro de pressão é a variável conjugada ao parâmetro de volume, e acaba por ser uma quantidade intensiva. Usando estas definições, é possível construir diagramas P-T (2) e P-V, a partir dos quais podemos ver como a nuvem de átomos sofre a transição da fase clássica para a fase quântica. Nosso principal interesse, especificamente, é medir a ordem da transição de fase.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Termodinâmica. Armadilha não-homogenea.

Referências:

- 1 ROMERO-ROCHÍN, V. Equation of state of an interacting bose gas confined by a harmonic trap: the role of the . **Physical Review Letters** v. 94, p. 130601, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.130601.
- 2 ROMERO-ROCHÍN, V.; SHIOZAKI, R. F.; CARACANHAS, M.; HENN, E. A. L.; MAGALHÃES, K. M. F.; ROATI, G.; BAGNATO, V. S. Observation of Bose-Einstein condensation in an atomic trap in terms of macroscopic thermodynamic parameters. **Physical Review A**, v. 85, p. 023632, 2012. DOI: 10.1103/PhysRevA.85.023632.

PG142

Reconhecimento de gestos manuais utilizando câmeras de profundidade

PRADO NETO, Elias Ximenes do¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

expn@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Visando o aprimoramento das interfaces gestuais (1), desenvolvemos um método eficiente para o reconhecimento de poses de mãos, capaz de localizar a posição dos dedos dos usuários que estejam levantados. Utilizamos como base para o seu funcionamento, o dispositivo para captura de imagens de profundidade *Microsoft Kinect*, além de métodos esqueletização poligonal (2) e análise de casco convexo. (3) O método apresentado também é totalmente compatível com outros dispositivos de captura de imagens de profundidade, como o *Prime Senses Prime Sensor* e *ASUS XTion*. Com base nos testes realizados, o algoritmo desenvolvido obteve a eficiência de 97% no reconhecimento de 2.126 imagens de profundidade de mãos distribuídas em cinco bases, sendo que o único critério para o reconhecimento foi, encontrar a quantidade de dedos que estavam levantados em cada mão. As imagens foram capturadas em um intervalo de distância de um até três metros do dispositivo. Embora todas as imagens sejam de mãos em posição aproximadamente frontal, estas encontram-se rotacionadas nos mais diversos ângulos em relação ao eixo de profundidade. Os resultados obtidos para imagens individuais ultrapassam os melhores métodos encontrados na literatura, sem que para isto haja a necessidade de treinamento preliminar do sistema, configurações especiais ou seqüenciamento do fluxo das imagens de profundidade. Deste modo além de fornecer esqueletizações propícias para análises de forma mais complexas, nosso método apresenta resultados animadores para o reconhecimento em tempo real de poses de mãos em frames individuais.

Palavras-chave: Reconhecimento de gestos. Esqueletização poligonal. Câmera de profundidade.

Referências:

- 1 JAIMES, R.; SEBE, N. Multimodal human-computer interaction: a survey. **Computer Vision and Image Understanding**, v.108, n. 1-2, p. 116-134,. 2007.
- 2 MANRESA, C.; VARONA, J.; MAS, R.; PERALES, F. J. Hand tracking and gesture recognition for human-computer interaction. **Electronic Letters on Computer Vision and Image Analysis**, v. 5, n. 3, p. 96-104, 2005.
- 3 WANG, T. Extraction of optimal skeleton of polygon based on hierarchical analysis1. **Chinese Academy of Surveying and Mapping**. Disponível em: <http://www.isprs.org/proceedings/XXXVIII/7-C4/272_GSEM2009.pdf>. Acesso em: 17 ago. 2012. .

PG143

Análise de composição de raios cósmicos de altas energias através de dados medidos pelo Observatório Pierre Auger

Ultra high energy cosmic rays composition analysis using Pierre Auger Observatory measured data

PRADO, Raul¹; BELLIDO, Jose Alfredo²; SOUZA, Vitor de¹

raul.prado@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²University of Adelaide - Austrália

O estudo de raios cósmicos têm sido muito importante nos últimos 100 anos, não apenas como fonte de informação sobre fenômenos astrofísicos, mas também como um grande laboratório natural para se estudar as interações fundamentais entre partículas elementares. Os experimentos desenvolvidos para estudar astrofísica de partículas diferem muito dos experimentos de astronomia convencional pelo fato de medirem o chuveiro de partículas secundárias gerado a partir da interação da partícula primária com a atmosfera, logo, as medidas são realizadas indiretamente. Ao longo do tempo, com a evolução das técnicas de medidas tornou-se possível detectar eventos gerados por partículas primárias cada vez mais energéticas. O observatório Pierre Auger, localizado na cidade de Malargue, Argentina, faz parte da mais nova geração de experimentos nessa área e, através de um sistema híbrido de detecção formado por tanques Cherenkov como detectores de superfície e telescópios de fluorescência, é capaz de medir chuviros formados por partículas primárias com energias acima de 10^{18}eV , alcançando até 10^{21}eV (4 ordens de grandeza acima do limite superior medido pelo LHC). (1) As três grandes questões abertas sobre raios cósmicos de altíssimas energias são: composição, fontes astrofísicas e espectro de energia. O presente trabalho está diretamente relacionado com a questão da composição e tem como objetivo inferir, através dos parâmetros dos chuviros atmosféricos medidos pelo observatório Pierre Auger, o tipo de partícula primária (alguns candidatos são: prótons, núcleos de carbono e núcleos de ferro). (2) O problema principal deste estudo é a grande flutuação natural dos parâmetros sensíveis a composição devido ao carácter probabilístico das interações elementares responsáveis pela primeira colisão do primário com os átomos da atmosfera. Com o objetivo de superar o efeito dessas flutuações e conseguir distinguir diferentes tipos de partículas primárias estamos estudando maneiras de aplicar métodos multiparamétricos aos dados obtidos pelo observatório Pierre Auger. A primeira etapa do projeto consiste em estudar e tratar cada parâmetro separadamente para então na próxima etapa serem utilizados juntos em uma análise discriminante multiparamétrica. Iniciamos o trabalho estudando o rise time ($t_{1/2}$) que é calculado através da distribuição temporal do sinal medido pelos detectores de superfície, e contém informações indiretas sobre a composição de partículas no chuveiro atmosférico. (3) Até o momento foi desenvolvido um método para tratar $t_{1/2}$ medido pelo observatório eliminando as suas dependências geométricas relativas a posição de cada detector e do chuveiro. A partir deste tratamento torna-se possível comparar $t_{1/2}$'s de diferentes eventos e avaliar como esse parâmetro varia em função da energia primária, além de estudar sua correlação com outros parâmetros de composição. Os resultados desse trabalho incluem: a) análise do método de correção do $t_{1/2}$ desenvolvido, com os testes de consistência e os cálculos dos erros envolvidos, b) apresentação e interpretação da evolução

do $t_{1/2}$ em função da energia e c) estudo da correlação entre $t_{1/2}$ e X_{max} , outro parâmetro sensível à composição.

Palavras-chave: Raios cósmicos. Análise de dados. Composição.

The cosmic rays study has been very important during the last 100 years, not only as a source of astrophysical phenomena information, but also as a natural laboratory to study fundamental interactions between elementary particles. The experiments developed to study astroparticle physics differ greatly from conventional astronomical experiments because they measure the shower of secondary particle generated from the collision of primary particle with atmosphere, thus, measures are taken indirectly. Over the years, the evolution of techniques of measurement became possible to detect events started by primary particle with more and more energy. The Pierre Auger observatory, located in Malague, Argentina, is a representative of the younger generation of cosmic rays experiments and, through a hybrid system consisting of Cherenkov tanks as surface detectors and fluorescence telescopes, is able to measure showers generated by primary particles with energy above $10^{18}eV$, coming up $10^{21}eV$ (4 orders above high limit measured by LHC). (1) The three bigger unresolved issues about ultra high energy cosmic rays are: composition, astrophysical sources and energy spectrum. This study is directly related with composition problem and aims to infer, using shower parameters measured by Pierre Auger observatory, type of primary particle (for instance, proton, carbon nuclei and iron nuclei). (2) The main problem in this study is the large natural fluctuation of composition sensitive parameters, due the probabilistic character of elementary interactions which command the first collision between primary particle and atoms of the atmosphere. Aiming to overcome fluctuations effects and to be able to distinguish different types of primary particle, we are studying ways to apply multivariate methods in Pierre Auger observatory data. The first stage of project is to study and treat each composition parameter separately and then next stage to use then in a multivariate discriminant analyses. We started the study by rise time ($t_{1/2}$), which is calculated through temporal distribution of surface detectors signals, and it contains indirect information about particle composition of atmospheric shower. (3) It was developed, up to now, a method to treat measured $t_{1/2}$ by observatory, eliminating its geometrical dependencies related with detector and shower position. From this treatment it becomes possible to compare $t_{1/2}$'s from different events and to evaluate the evolution of this parameter as a function of energy, besides studying correlation with another composition sensitive parameter. The results of this project include: a) analysis of correction method of $t_{1/2}$ developed, with consistency tests and uncertainties calculations, b) presentation and interpretation of energy evolution of $t_{1/2}$, and c) correlation study using $t_{1/2}$ and X_{max} , another composition sensitive parameter.

Keywords: Cosmic rays. Data analysis. Composition.

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 KAMPERT, K. ; UNGER, M. **Measurements of the cosmic ray composition with air shower experiments**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1201.0018>>. Acesso em: 13 ago.2012.

3 WALKER, R.; WATSON A. A. Measurement of the elongation rate of extensive air showers produced by primary cosmic rays of energy above 2×10^{17} eV. **Journal Physics G: nuclear physics**, v. 7,n.9, p. 1297-1309, 1981.

PG144

Um modelo estocástico para a transcrição dos genes de segmentação da *Drosophila melanogaster*

PRATA, Guilherme Nery¹; HORNOS, José Eduardo Martinho¹

blane@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Sabemos que a informação genética codificada no DNA é expressa em termos de proteínas. Isto envolve primeiramente um processo de transcrição de sequências contidas no DNA na forma de um RNA que, posteriormente, é traduzido em proteína. Sabemos também que, apesar de todas as células de um organismo possuírem o mesmo DNA, elas não expressam todas as proteínas ao mesmo tempo e, de fato, muito da vida depende desta capacidade, mesmo porque muitas das falhas que ocorrem acabam não representando ameaça imediata para a vida do organismo, o que sugere a existência de mecanismos de controle contra eventuais alterações. Toda a modulação da síntese de um transcrito gênico e de seu produto proteico denomina-se *regulação gênica*. Embora todo passo da síntese proteica possa ser regulado, nosso interesse é a regulação que ocorre no início da transcrição, mediada pelas ligações de proteínas regulatórias a regiões específicas do DNA denominadas *sítios*. Uma vez ligadas a sítios, as proteínas regulatórias são denominadas *ativadoras* quando estimulam a transcrição e *repressoras* quando a dificultam. Nosso trabalho se concentra na expressão do gene *even-skipped* (*eve*), importante para o processo de segmentação, que ocorre durante a embriogênese da *Drosophila*. A expressão de *eve* observada ocorre cerca de 2 horas após a fecundação, leva cerca de 50 minutos e caracteriza-se pela formação de máximos de expressão - experimentalmente observados e medidos em unidades de intensidade de fluorescência - bem localizados em regiões alternadas ao longo do eixo anterior-posterior (AP) do embrião, configurando visualmente um conjunto de sete listras. A formação dessas listras é regulada por vários sítios regulatórios concentrados em 5 regiões, denominadas *enhancers*. Nossa atenção, entretanto, está voltada para a formação de somente uma: a listra 2. Na literatura (1) encontramos resultados indicando que a listra 2 é regulada por um *enhancer* de 34 sítios que podem ser ocupados por 7 diferentes proteínas regulatórias: Bicoid (Bcd), Hunchback (Hb), Giant (Gt), Krüppel (Kr), Knirps (Kni), Caudal (Cad) e Tailless (Tll). Para descrever a dinâmica do mRNA produzido ao longo do embrião, utilizamos um modelo, proposto por Sasai e Wolynes (2) e resolvido exatamente por Innocentini e Hornos (3), baseado num processo de Markov para um sistema de dois estados - um de alta produtividade (ligado) e outro de baixa produtividade (desligado) - regulado por um agente externo. O estado do sistema é, então, caracterizado pelo nível de ativação transcrricional e pelo número de moléculas de mRNA transcritas, a variável estocástica do processo. Naturalmente, vislumbramos com esse modelo a compreensão de redes genéticas. Além de descrever a dinâmica do número médio de mRNA, nossos resultados fazem previsões acerca das dinâmicas da variância, desvio quadrático (flutuação) - não observada experimentalmente até o momento - e, sobretudo, do ruído (razão entre flutuação e o número médio que indica a precisão do processo). Entre eles, vemos que, no momento em que a expressão exibe mais fortemente o caráter de listra, há um processo de minimização do ruído em torno do pico de expressão e a evolução para o regime estacionário.

Palavras-chave: *Drosophila*. Transcrição. Estocástico.

Referências:

- 1 JANSSENS, H. et al. Quantitative and predictive model of transcriptional control of the *Drosophila melanogaster even skipped* gene. **Nature Genetics**, v. 38, n. 10, p. 1159-1165, 2006.
- 2 SASAI, M; WOLYNES, P. G. Stochastic gene expression as a many-body problem. **Proceedings of the National Academy of Sciences of United States of America**, v. 100, n. 5, p. 2374-2379, 2003.
- 3 INNOCENTINI, G. C. P. **Modelamento estocástico para a expressão gênica**. 2008. 53 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.

PG145

Construção e caracterização de um microscópio óptico por absorção de dois fótons para imagens de sistemas biológicos.

PRATAVIEIRA, Sebastião¹; GRECCO, Clóvis¹; COSCI, Alessandro¹; MISOGUTI, Lino¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹
sp_prata@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na área de biologia e medicina, um diagnóstico preciso das características morfológicas e metabólicas de um tecido e/ou órgão é fundamental, tanto para definir a presença de alterações patológicas, quanto para avaliar a resposta do tecido durante um tratamento. Neste sentido, o uso de técnicas ópticas para obter imagens é uma excelente alternativa para visualização de células, pois apresentam diversas vantagens em comparação com outras técnicas e possui resolução espacial adequada. Técnicas ópticas de diagnóstico também podem ser realizadas sem a necessidade de remoção de amostra tecidual e apresenta uma resposta praticamente instantânea. O uso de técnicas de óptica não linear, tais como, fluorescência devido à absorção de dois fótons, é um exemplo de técnica óptica onde obtemos imagens de tecidos vivos com uma resolução espacial subcelular e profundidade de investigação na amostra superior a técnica de microscopia confocal tradicional. (1) Com isso, este estudo tem por objetivo desenvolver um microscópio óptico não linear, para adquirir imagens de fluorescência devido à absorção de dois fótons de amostras *in vivo*. A calibração, caracterização e os primeiros testes com amostras biológicas foram feitas e serão apresentadas. Nestes testes foi possível a observação de estruturas celulares de diferentes tecidos biológicos. Na primeira etapa utilizamos como fonte de excitação para obtermos absorção de dois fótons um laser de titânio-safira ($\text{Ti}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$) comercial, operando no regime de femtossegundos. Contudo, outra etapa do projeto, que está em desenvolvimento, envolve a montagem de um laser de femtossegundos utilizando o cristal $\text{Cr}^{3+}:\text{LiCAF}$ operando no regime de femtossegundos. Este tipo de laser ainda não existe comercialmente, porém seu custo de montagem e sua eficiência para a utilização em sistemas de microscopia são bastante atrativas. (2) Essa maior eficiência ocorre devido ao bombeio direto do cristal utilizando lasers de diodo. Resultados sobre a montagem e caracterização deste laser também serão apresentados neste trabalho. Após a finalização da montagem do microscópio e do laser, estudos básicos da interação luz - tecidos biológicos, por exemplo, em diagnóstico de neoplasias e em Terapia Fotodinâmica serão realizados utilizando essa instrumentação.

Palavras-chave: Microscópio óptico . Absorção de dois fótons. Laser estado sólido.

Referências:

- 1 MASTERS, B. R.; SO, P. T. C. **Handbook of biomedical nonlinear optical microscopy**. New York: Oxford University Press, 2008.
- 2 DEMIRBAS, U. F. et al. Low-cost, single-mode diode-pumped Cr:Colquiriite lasers. **Optics Express**, v.17, n. 16, p.14374-14388, 2009.

PG146

Processamento digital de sinais de ressonância magnética nuclear através de redes neurais artificiais

QUEIROZ, Gylherme Emmanuel Tagliaferro de¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco¹

getqueiroz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Redes neurais artificiais (RNA) são modelos computacionais inspirados por redes neurais biológicas, isto é, uma rede neural artificial é um processador massivamente paralelo formado por unidades de processamento simples, os quais tem uma propensão natural para armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para uso. (1) Pesquisas no campo das redes neurais têm atraído crescente atenção nos últimos anos, este cenário é resultado, em parte, do reconhecimento das inúmeras possibilidades envolvendo aplicação de RNA e também pelo fato de que embora os primeiros trabalhos em redes neurais artificiais tenham sido publicados a mais de cinquenta anos, o tema só começou a ser fortemente pesquisado a partir do início da década de noventa, possuindo ainda um potencial de pesquisa imenso. (2) Tendo em vista os inúmeros resultados positivos em aplicações envolvendo RNA, fica evidente que a investigação de sua aplicabilidade em problemas de solução complexa é um esforço justificável e necessário. O problema específico em questão é obter distribuição de tempos de relaxação (T_1 e T_2) através de sinais de decaimento de magnetização em experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) envolvendo meios porosos. Estes sinais são formados por múltiplas componentes de decaimento exponencial e descritos, em uma forma geral, por meio da seguinte equação $m(y) = \int g(x)k(y, x)dx$, conhecida como equação integral de Fredholm do primeiro tipo, onde normalmente $m(y)$ e $k(y, x)$ são conhecidas *a priori*. A forma discreta da equação anterior para um sinal de decaimento de uma determinada distribuição de valores T_2 pode ser descrita por $m(\tau) = \sum_{i=1}^n g(T_{2i})(1 - \exp^{-\frac{\tau}{T_{2i}}})$, desta forma, para obter a distribuição dos tempos de relaxação $g(T_{2i})$ 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 (3), conhecida como problemas inversos mal-postos. Diversos métodos têm sido propostos para a inversão destas equações integrais e grande parte deles possui uma característica comum importante: a alta complexidade computacional. Neste ponto reside a principal vantagem da utilização das RNAs, a fase de operação da rede (após o treinamento) possui complexidade computacional relativamente baixa e o processamento dos dados é realizado de forma quase instantânea. Pretende-se, portanto, neste trabalho, obter as distribuições de tempos de relaxação e confrontar os resultados das inversões realizadas, utilizando diferentes arquiteturas e topologias de redes neurais artificiais como, por exemplo, Perceptron Multicamadas (PMC), Redes de Funções de Base Radial (RBF), Hopfield e etc.

Palavras-chave: Processamento digital de sinais. Redes neurais artificiais. Ressonância magnética nuclear.

Referências:

- 1 HAYKIN, S. **Redes neurais: princípios e prática**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001. 900p.
- 2 SILVA, I. N. da; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. **Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas**. São Paulo: Artliber, 2010. 393p.

3 HANSEN, P. C. **Rank-deficient and discrete Ill-posed problems**: numerical aspects of linear inversion. Philadelphia: SIAM, 1998. 263p.

PG147

Preparação e estudos espectroscópicos de materiais luminescentes baseados em complexos de Irídio(III) incorporados em vidros mesoporosos

QUEIROZ, Thiago Branquinho de¹; BOTELHO, Moema de Barros e Silva¹; ECKERT, Hellmut¹; CAMARGO, Andrea Simone Stucchi de¹
branquinho@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho apresenta-se o desenvolvimento, preparação e caracterização de um material luminescente de alta eficiência, baseado na incorporação de um complexo de Irídio (III) (1) em vidros mesoporosos sódio-alumino-silicato, preparados por metodologia sol-gel. (2) Com intuito de obter um material quimicamente estável, com alta dispersão molecular do emissor, e fácil preparação, a inserção do complexo na matriz foi realizada por troca iônica, em que o complexo catiônico se liga a sítios de densidade eletrônica negativa da rede $(AlO_4)^-$. Um controle de dispersão molecular do centro emissor foi proposto variando-se a relação Si/Al na matriz (entre 2 e 9), de maneira a distribuir espacialmente os sítios aniônicos ativos $(AlO_4)^-$ entre os sítios neutros SiO_4 . As matrizes foram caracterizadas do ponto de vista estrutural por diversas técnicas de RMN de estado sólido, FTIR, DRX e sorção de N_2 . As propriedades ópticas do emissor em solução e em estado sólido foram caracterizadas por medidas de absorção UV-Vis, espectroscopia óptica, tempo de vida de estado excitado e rendimento quântico absoluto. Os resultados fotofísicos foram analisados com a ajuda da teoria do funcional de densidade (em inglês, "Density Functional Theory", DFT). A partir do tratamento convencional realizado para complexos de Irídio (III) em estado líquido, foram desenvolvidos e analisados métodos alternativos para tratar o problema em uma matriz rígida. O formalismo aplicado contribuiu para uma descrição detalhada da natureza dos seus orbitais moleculares, ocupados e não ocupados, bem como mudanças devido à inserção do complexo na matriz.

Palavras-chave: Vidros mesoporosos. Complexos de Irídio(III). Espectroscopia óptica.

Referências:

- 1 FERNÁNDEZ-HERNÁNDEZ, J. M.; YANG, C. H.; BELTRÁN, J. I.; LEMAU, V.; POLO, F.; FRÖHLICH, R.; CORNIL, J.; DE COLA, L. Control of the mutual arrangement of cyclometalated ligands in cationic iridium(III) complexes. synthesis, spectroscopy, and electroluminescence of the different isomers. **Journal of the American Chemical Society**, v. 133, n. 27, p. 10543-10588, 2011.
- 2 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.

PG148

Estudos funcionais e estruturais da classe de enzimas endoglucanase ghf45 aplicados ao desenvolvimento de coquetéis enzimáticos

RAMIA, Marina Paglione¹; POLIKARPOV, Igor¹

marinapramia@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Glicosil hidrolases são uma classe de enzimas capazes de catalisar a hidrólise de ligações glicosídicas entre polímeros de glicose ou entre uma glicose e outra molécula não polissacarídica. Hoje são conhecidas 125 famílias de glicosil hidrolases, que na maioria dos casos tem como mecanismo de ação a hidrólise da ligação glicosídica catalisada por dois resíduos de aminoácidos da enzima: um ácido geral e um nucleófilo. Dependendo da posição espacial desses resíduos catalíticos, a hidrólise ocorre através de retenção total ou inversão geral da configuração anomérica. (1) As celulasas se diferenciam das outras glicosil hidrolases por hidrolisar ligações beta-1,4 entre resíduos de glicose. (2) A hidrólise da celulose resultando em monômeros de glicose é realizada por sistemas enzimáticos que geralmente incluem três tipos de enzimas que diferem com base no modo de catálise da celulose, mas agem sinergisticamente: endo-1,4-beta-glucanase, exo-1,4-beta-glucanase ou celobiohidrolase, e celobiase ou beta-glucosidase. (3) As endo-glucanases atacam a parte amorfa da celulose através da clivagem das ligações internas nas microfibrilas, diminuindo o tamanho da cadeia, gerando oligossacarídeos de diferentes tamanhos e novas extremidades livres, água e celooligossacarídeos que serão hidrolisados formando celobiose e glicose. A família 45 das glicosil hidrolases utilizam a inversão como mecanismo de hidrólise. Compartilham de um domínio catalítico pequeno (20 kDa) e grande variedade de substratos, como a celulose e seus derivados. Essa classe de enzimas tem sido bem caracterizada do ponto de vista funcional, entretanto, poucas estruturas foram resolvidas, o que dificulta o entendimento de seu mecanismo de ação. A fim de sanar essa lacuna, propõe-se neste trabalho o estudo estrutural das endo-glucanases, de modo que o conhecimento do comportamento do microorganismo durante o processo de fermentação, assim como a sua ação enzimática, torne possível o aprimoramento de métodos; a otimização; modificação e controle de processos.

Palavras-chave: Endoglucanases. Celulasas. Cristalização.

Referências:

- 1 HENRISSAT, B. A classification of glycosyl hydrolases based on amino-acid sequence similarities. **Biochemistry Journal**, v. 280, pt. 2, p. 309-316, 1991.
- 2 HENRISSAT, B.; BAIROCH, A. New families in the classification of glycosyl hydrolases based on amino- acid sequence similarities. **Biochemistry Journal**, v. 293, pt. 3, p. 781-788, 1993.
- 3 FELIX, C. R.; LJUNGODHAL, L.G. The cellulosome: the exocellular organelle of clostridium. **Annual Review of Microbiology**, v. 47, p. 791-819, 1993. DOI: 10.1146/annurev.mi.47.100193.004043.

PG149

Utilização de técnicas espectroscópicas e de imagens no estudo e caracterização de doenças em citros: Greening (HLB) e cancro cítrico.

RANULFI, Anielle Coelho¹; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira²; FERREIRA, Ednaldo José²; VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro²; KUBOTA, Thiago Massaiti Kuboyama¹; DA SILVA, Jéssica Thaíse Batista³; SAUCE, Rafael Silva⁴
aniranulfi@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação

³Departamento de Matemática - UFSCar

⁴Departamento de Biologia - UFSCar

O agronegócio é fundamental para a economia brasileira, representa cerca de um terço do nosso PIB e tem dado grande contribuição às exportações de commodities e produtos agroindustriais. A laranja faz com que o país torne-se o líder de produção no mundo, detendo 25% desta. Já em se tratando do suco de laranja, o Brasil detém mais da metade da produção e exporta 98% desta. (1) A área colhida com laranja deve expandir-se nos próximos anos, dos atuais 856 mil para 962 mil hectares em 2020/2021. Porém, um dos principais fatores atuais que restringem os lucros e a expansão da citricultura é, em especial, que as plantações de frutas cítricas podem ser acometidas por uma variedade de doenças e pragas. O monitoramento destas é fundamental para evitar danos aos frutos e a necessidade de erradicação de plantações inteiras. Atualmente, o controle de doenças é realizado apenas por inspeção visual e avaliações por PCR de poucas árvores somente para confirmar a presença do patógeno no campo. Desta forma, a presente proposta tem como objetivo explorar o uso das técnicas de imagens e espectroscópicas para realizar o diagnóstico de doenças de citros em larga escala no campo, visando à construção de mapas de infestação. Este tipo de informação deve auxiliar os produtores na tomada de decisão e no controle das doenças. Pretende-se utilizar a caracterização espectroscópica de folhas e metabólitos isolados para ajudar no entendimento dos processos envolvidos em cada doença, tentando identificar os principais mecanismos de reação da planta e consequências metabólicas. Inicialmente, o foco será nas duas principais doenças de citros que atacam os pomares atualmente: HLB (Citrus Greening) e o Cancro cítrico. Técnicas fotônicas com alto potencial de compactação serão testadas como ferramentas de diagnóstico, tais como: Espectroscopia de Fluorescência Induzida por Laser (do inglês, *Laser Induced Fluorescence Spectroscopy* - LIFS), Espectroscopia de Emissão Óptica com Plasma Induzido por Laser (do inglês, *Laser Induced Breakdown Spectroscopy* - LIBS), e Imagens de Fluorescência. Pretende-se avaliar a possibilidade de se realizar o diagnóstico precoce destas doenças, visto que em torno de 66% de plantas doentes assintomáticas (HLB) são mantidas no campo. Em estudos anteriores realizados no Laboratório de Ótica e Fotônica da Embrapa Instrumentação, foi possível diagnosticar a presença do HLB em mudas assintomáticas ao compará-las com mudas saudáveis já no primeiro mês após a inoculação, utilizando-se das técnicas fotônicas. (2) Empregando o sistema desenvolvido no próprio laboratório, Cardinali analisou folhas sadias, doentes com HLB-sintomáticas, doentes com HLB-assintomáticas e com a doença Clorose

Variegada do Citros; a taxa de acerto médio do classificador utilizado foi de 90%, com desvio padrão de 7%. (3) Tais estudos demonstram que as técnicas são promissoras, robustas e extremamente sensíveis. As técnicas LIFS e LIBS já possuem formato portátil, o que viabilizaria facilmente testes e ações em campo.

Palavras-chave: Espectroscopia de fluorescência. Imagem de fluorescência. Greening.

Referências:

- 1 NEVES, M. F.; TROMBIN, V. G.; MILAN, P.; LOPES, F. F.; CRESSONI, F.; KALAKI, R. **O retrato da citricultura brasileira**. 2010. Disponível em: <http://www.citrusbr.com.br/download/biblioteca/Apresentacao_Marcos_Fava_evento_valor.pdf>. Acesso em: 20 ago. 2012.
- 2 PEREIRA, F. M. V.; MILORI, D. M. B. P.; PEREIRA-FILHO, E. R.; VENÂNCIO, A. L.; RUSSO, M. S. T.; CARDINALI, M. C. B.; MARTINS, P. K.; FREITAS-ASTÚA, J. Laser-induced fluorescence imaging method to monitor citrus greening disease. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 79, n. 12, p. 90-93, 2011.
- 3 CARDINALI, M. C. B. **Diagnóstico de Huanglongbing (HLB) em citros utilizando técnicas fotônicas**. 2012. 119 p. Dissertação (Mestrado - Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

PG150

Modelagem de grãos confinados em invólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem

RIGO, Gustavo Vrech¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹; CRUVINEL, Paulo Estevão²

gvrech@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa - São Carlos

A formação de arcos – estruturas que promovem a anisotropia de forças dentro de um sistema – acontece corriqueiramente dentro de silos ou maquinaria agrícola, sua formação acaba prejudicando o fluxo de partículas dentro destes sistemas. De uma forma geral, 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.(1) um líquido ou gás, e esse comportamento não é dedutível apenas do comportamento individual das partículas componentes. Um problema de interesse prático é a mecânica de grãos dentro de silos, é comum a perda pós-colheita devido à problemas de armazenamento de grãos. Conforme(2), é corriqueiro ocorrer entupimentos dentro da saída de silos e maquinaria agrícola devido à própria configuração do sistema granular, formando os arcos. O presente trabalho modela os arcos a partir de redes complexas (3) – seus nós representam cada um dos grãos do sistema, enquanto que as ligações a força trocada entre cada uma delas - a partir da topologia das redes formadas estuda a anisotropia inerente das forças que compõe o sistema. Para tal foram realizados diversos ensaios tomográficos utilizando protótipos de pequeno tamanho, tipicamente 2 a 3 centímetros, contendo diversos tipos de grãos. Cada um destes protótipos foi reconstruído digitalmente utilizando técnicas de visualização tridimensional. De acordo com o modelo proposto é necessário a segmentação de cada grão, assim como determinar com precisão cada plano de contato, determinando os nós e ligações da rede. Nosso presente objetivo é encontrar um método eficiente que retorne estas características da rede de forma eficiente e precisa. O objetivo deste trabalho é partindo destes protótipos inferir como grãos se comportam dentro de silos de grande porte utilizando simulações computacionais.

Palavras-chave: Redes complexas. Redes de força. Métodos de imagem.

Referências:

1 JAEGER, H.; SHINBROT, T.; UMBANHOWAR, P. Does the granular matter? **Proceedings of the National Academy of Science of the USA** v.97,n.2, p.12959-12960,2000.

2 ZURIGUEL, I.; PUGNALONI L. A.; GARCIMARTÍN, A.; MAZA, D. Jamming during the discharge of grains from a silo described as a percolating transition. **Physical Review E**, v. 68, p.030301-030301-4, 2003.

3 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **SIAM Review** v.45, n.2, p.167-256,2003.

PG151

Seleção de coerências de múltiplo quantum por RMN em materiais com ordenamento magnético

RIVERA ASCONA, Christian¹; BONAGAMBA, Tito José¹

crivera@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de materiais magnéticos usando-se Ressonância Magnética Nuclear em campo magnético externo nulo (RMNz), via a análise e manipulação das transições entre os estados de energia nucleares é uma ferramenta importante no processo de caracterização das propriedades elétricas e magnéticas desses materiais.(1) Na aplicação de dois ou mais pulsos de radiofrequência (RF) foram observados ecos de múltiplo quantum (MQ). O aparecimento destes múltiplos ecos está relacionado com as distribuições dos acoplamentos Zeeman e/ou quadrupolar elétrica que existem na região onde o eco se origina. Discretizando as fases dos pulsos de RF de maneira conveniente podem ser selecionadas transições de MQ específicas.(2) Os resultados teóricos obtidos da aplicação de mais de dois pulsos de RF mostram grande potencial para o desenvolvimento de métodos bidimensionais, que permitirão a construção de espectros que correlacionam diferentes coerências de MQ. Para isso, é necessário o desenvolvimento da teoria complementar para o entendimento dos sinais de RMN obtidos após a aplicação de n pulsos de RF, o que fornecerá uma maior riqueza de informações sobre os sistemas físicos estudados.

Palavras-chave: Seleção de coerências. Transições de múltiplo quantum. RMN campo zero.

Referências:

1 TOZONI, J. R.; TELES, J.; AUCCAISE, R.; OLIVEIRA-SILVA, R.; RIVERA-ASCONA, C.; VIDOTO, E.L.G.; GUIMARÃES, A. P.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J. Multi-quantum echoes in GdAl₂ zero-field high-resolution NMR. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 212, n. 2, p. 265-273, 2011.

2 TELES, J.; DEAZEVEDO, E. R.; AUCCAISE, R.; SARTHOUR, R. S.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J. Quantum state tomography for quadrupolar nuclei using global rotations of the spin system. **Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 15, p. 154, 2007.

PG152

Ordenamento em perovsquitas complexas

RODRIGUES, João Elias Figueiredo Soares¹; PASCHOAL, Carlos William de Araújo²; MACIEL, Adeilton Pereira³; BEZERRA, Débora Morais⁴
rodrigues.joaaoelias@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Física - UFMA

³Departamento de Química - UFMA

⁴Instituto de Química de São Carlos - USP

Neste trabalho, desenvolveu-se a síntese e as propriedades de perovsquitas complexas com fórmula geral $Ba_3MNb_2O_9$, onde $M = Ca$ (BCN) e Zn (BZN), na forma de cerâmicas em pó, pastilhas sinterizadas e filmes finos obtidos pelo método de Pechini. O alvo do trabalho consistiu na observação da formação da fase perovsquta ordenada e parcialmente ordenada na forma 1:2 através das medidas de difração de raios X e espectroscopia Raman dos sistemas em estudo. Abordaram-se sucintamente os aspectos estruturais e propriedades gerais em perovsquitas simples e complexas, enfatizando nesta última a importância da fase ordenada nas propriedades físicas. A teoria fenomenológica de Landau foi empregada no entendimento da dinâmica da transição de fase ordem-desordem nos ordenamentos convergente e não convergente. Realizou-se a sondagem da cinética de cristalização das cerâmicas em pó de BCN e BZN, observando-se a formação da fase parcialmente ordenada livre de impurezas a partir de 900°C/2h com tamanho médio das partículas estimado em 100 nm. Mediante o ajuste dos espectros Raman coletados, correlacionou-se ambas a posição e a largura das bandas próximas a 800 cm^{-1} com a temperatura de calcinação a partir do comportamento do modo stretching A_{1g} . Mostrou-se a formação da fase parcialmente ordenada de BCN em pastilhas sinterizadas a 1600°C/2h, cujo parâmetro de ordem estimado pelos espectros Raman aproximou-se de 0,97. Por outro lado, o parâmetro de ordem estimado pela difração de raios X chegou a 0,50 em pastilhas de BZN sinterizadas pelo método cerâmico de alta temperatura. Por fim, mapeou-se a impureza de niobato de bário na superfície dos filmes finos de BZN através de mapas Raman no plano x-y. Medidas de mapeamento Raman em profundidade revelaram que tais filmes possuem espessuras entre 1,7 μm e 2,1 μm . (1)

Palavras-chave: Perovsquta complexa. Ordenamento estrutural 1:2. Filmes finos.

Referências:

1 RODRIGUES, J. E. F. S. **Ordenamento em perovsquitas complexas**. 2012. 119 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão, Maranhão, 2012.

PG153

Estudo estrutural da proteína old yellow enzyme de *Trypanosoma cruzi*

RODRIGUES, Nathalia de Campos¹; CANDURI, Fernanda²; OLIVA, Glaucius¹; BORGES, Júlio César²
nathcampos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

A doença de Chagas é uma importante doença parasitária resultante da infecção pelo protozoário parasito hemoflagelado *Trypanosoma cruzi*, tendo insetos triatomíneos como vetores. Estimativas apontam que existam cerca de 10 milhões de infectados em todo o mundo, sendo que grande parte concentra-se em áreas endêmicas em 21 países da América Latina.(1) A proteína Old Yellow Enzyme de *T.cruzi* (TcOYE) consiste em uma NADPH oxidoreductase que contém a flavina mononucleotídeo como grupo prostético. A TcOYE catalisa a síntese de prostaglandina por meio da conversão de prostaglandina H2 em prostaglandina F2 alfa. Esta proteína também está envolvida na metabolização de compostos atualmente administrados no tratamento da doença de Chagas, assim como de compostos quinonas e nitroderivados descritos como promissores no desenvolvimento de novos quimioterápicos.(2) A TcOYE foi expressa heterologicamente em *E. coli* e esta proteína recombinante foi purificada para a realização de ensaios de cristalização. Cristais foram submetidos à difração de raios X, e os dados foram coletados e processados. Estruturas cristalográficas foram determinadas para as formas cristalinas P212121 (forma cristalina I) e P21 (forma cristalina II) e depositadas no banco de Dados de Proteínas (PDB). O modelo cristalográfico determinado para a enzima TcOYE foi utilizado para uma análise *in silico* através da técnica de docagem molecular com o composto natural beta-lapachona. A beta-lapachona é um substrato para a TcOYE utilizado como possível candidato à fármaco ou como modelo para compostos mais seletivos ou mais ativos. Assim, as interações observadas entre a beta-lapachona e o complexo binário TcOYE-FMN também são descritas neste trabalho e visam contribuir para a melhor compreensão do mecanismo de ação desta enzima.

Palavras-chave: Doença de Chagas . Tripanossomatídeos. Flavoproteínas.

Referências:

- 1 SAVIOLI, L.; DAUMERIE, D. **Working to overcome the global impact of neglected tropical diseases: first WHO report on neglected tropical diseases**. 2010. Disponível em: <http://whqlibdoc.who.int/publications/2010/9789241564090_eng.pdf>. Acesso em: 02 ago. 2012.
- 2 KUBATA, B. K. et al. A key role for old yellow enzyme in the metabolism of drugs by *Trypanosoma cruzi*. **Journal of Experimental Medicine**, v. 9, p.1241-1251, 2002. Disponível em: <<http://jem.rupress.org/content/196/9/1241.full.pdf>>. Acesso em: 02 ago. 2012.

PG154

Intensificação da formação de PpIX e penetração de medicamentos tópicos para a terapia fotodinâmica

RODRIGUES, Phamilla Gracielli Sousa¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

phamilla@ymail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Segundo o Instituto Nacional do Câncer (INCA), entre os tumores de pele, o não-melanoma é o de mais baixa mortalidade, porém, é o mais frequente no Brasil, apresentando uma estimativa de mais de 134.000 novos casos para o ano de 2012. (1) Os tratamentos convencionais visam a eliminação da lesão por via mecânica, cirúrgica ou química, porém, mesmo que eficientes em estágios iniciais, apresentam desvantagens como a mutilação e outros efeitos colaterais. (2) Como alternativa de tratamento, a terapia fotodinâmica (TFD) conquistou destaque no tratamento de câncer devido aos efeitos colaterais controlados, menos adversos e com resultados bastante satisfatórios. A técnica consiste do uso de um agente fotossensibilizador que pode ser ativado por uma fonte de luz e assim capaz de interagir com o oxigênio presente no tecido biológico. Desta interação, ocorre uma reação que irá promover a morte celular. (3) Apesar do sucesso da técnica, um fator limitante é a penetração do agente fotossensibilizador no tecido biológico. O objetivo deste estudo é a avaliação de meios para a otimização da penetração de fármacos capazes de promover a produção de protoporfirina IX (PpIX), um agente fotossensibilizante para a TFD, e também, avaliar a uniformidade, intensidade e profundidade de necrose em tecido biológico. Dentre os experimentos propostos, serão avaliados a associação de técnicas como o uso de ultrassom, furos mecânicos com micro agulhas e micro furos promovidos por laser operando em regime de pulsos ultracurtos. Serão utilizados ratos machos da linhagem Wistar para os experimentos *in vivo*, os quais serão divididos em grupos e avaliados segundo a técnica empregada em associação com a TFD. Serão utilizados os comprimentos de onda de 630 e 410 nm para a realização da TFD, e doses de 50, 100 e 150J/cm² de energia entregue ao tecido serão avaliadas para as intensidades de 100 e 150mW/cm². A formação de PpIX será acompanhada via espectroscopia de fluorescência a fim de determinar o tempo ótimo para o máximo de formação do agente fotossensível no tecido biológico e assim proceder com a iluminação. Trinta e seis horas após o procedimento da TFD, o animal será eutanasiado e o tecido alvo encaminhado para o procedimento histológico. Espera-se que o objetivo possa ser alcançado tornando factível a TFD para o tratamento de carcinomas mais profundos.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Laser pulsado. Ultrassom.

Referências:

1 INSTITUTO NACIONAL DE CÂNCER. **Tipos de câncer:** pele não melanoma. Disponível em: <<http://www2.inca.gov.br>>. Acesso em: 13 agosto 2012 .

2 SHARMAN, W.M; ALLEN, C.M; VAN LIER, J.E . Photodynamic therapeutics: basic principles and clinical applications. **Drug Discovery Today**, v.4, n.11, p.507-517,1999.

3 MIRONOV, A.F. et.al. New photosensitizers of bacteriochlorin series for photodynamic cancer therapy. **Russian Journal of Bioorganic Chemistry**, v.29, n.2, p.190-197, 2003.

PG155

Fabricação de microestruturas dopadas com nanofios de ZnO via fotopolimerização por absorção de dois fótons

RODRIGUEZ, Ruben Dario Fonseca¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

rubenfonseca@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Recentemente, métodos para a dopagem de microestruturas poliméricas têm sido desenvolvidos, devido ao interesse de fabricar novos dispositivos com características específicas. Materiais semicondutores constituem uma importante opção para o desenvolvimento de novos dispositivos com potenciais aplicações em óptica e fotônica. Desta forma, no presente trabalho produzimos microestruturas, através da técnica de fotopolimerização via absorção de dois fótons, dopadas com nanofios de ZnO, um material que vem sendo amplamente explorado devido as suas interessantes propriedades ópticas e elétricas. Para a fabricação das microestruturas, utilizamos um oscilador laser de Ti:safira que produz pulsos de aproximadamente 100 fs em 800 nm. A intensidade dos pulsos de femtossegundos é alta o suficiente para induzir a absorção de dois fótons em torno do volume focal, localizando a polimerização a esta região. Portanto, através da varredura do feixe na resina polimérica fabrica-se a estrutura desejada. Neste trabalho, desenvolvemos uma metodologia para introduzir nanofios de ZnO às microestruturas fabricadas, a partir da mistura do pó de nanofios de ZnO à resina acrílica. As amostras produzidas foram caracterizadas por microscopia óptica, microscopia eletrônica de varredura, espectroscopia de energia dispersiva, difração de Raios X, espectroscopia de espalhamento micro-Raman e fluorescência por um e dois fótons. Observamos que as microestruturas produzidas apresentam propriedades semelhantes as dos nanofios individuais. Sendo assim, a metodologia descrita aqui pode ser usada como mais uma opção na concepção de novos dispositivos tecnológicos.

Palavras-chave: Absorção de dois fótons. Fotopolimerização. Nanofios de ZnO.

Referências:

- 1 MALINAUSKAS, M.; GILBERGS, H.; ZUKAUSKAS, A.; PURLYS, V.; PAIPULAS, D.; GADONAS, R. A femtosecond laser-induced two-photon photopolymerization technique for structuring microlenses. **Journal of Optics**, v. 12, n. 3, p. 035204-1-035204-8, 2010.
- 2 SCRIMGEOUR, J.; SHARP, D. N.; BLANFORD, C. F.; ROCHE, O. M.; DENNING, R. G.; TURBERFIELD, A. J. Three-dimensional optical lithography for photonic microstructures. **Advanced Materials**, v. 18, n. 12, p. 1557-1560, 2006.
- 3 SERBIN, J.; OVSIANIKOV, A.; CHICHKOV, B. Fabrication of woodpile structures by two-photon polymerization and investigation of their optical properties. **Optics Express**, v. 12, n.21, p. 5221-5228, 2004.

PG156

Cristalização da enzima Adenilosuccinato Liase (ADSL) da via de salvação de purinas do parasita *Schistosoma mansoni*

ROMANELLO, Larissa¹; TORINI, Juliana Roberta¹; BRANDÃO NETO, José²; DE MARCO, Ricardo¹; PEREIRA, Humberto D'Muniz¹
larissa.romanello@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Diamond Light Source. Harwell Science and Innovation Campus Didcot. Oxfordshire OX11 0DE

O *Schistosoma mansoni*, parasita responsável pela esquistossomose, doença que afeta cerca de 300 milhões de pessoas em todo mundo, não possui a via de síntese de purinas, dependendo integralmente da via de salvação de purinas para seu suprimento dessas bases. A enzima adenilosuccinato liase (ADSL) é uma das enzimas desta via responsável pela hidrólise de adenilsuccinato em fumarato e AMP. Esta via tem sido citada como alvo potencial para o desenvolvimento de novos fármacos contra a esquistossomose. Os objetivos principais deste projeto são: realizar a amplificação e clonagem do cDNA, expressão, purificação e caracterização bioquímica das enzimas, determinar as constantes catalíticas para os diversos substratos das enzimas e a estrutura tridimensional por difração de raios-X. Este trabalho faz parte de um projeto maior que visa a obtenção de todas as estruturas das enzimas envolvidas na via de salvação de purinas de *Schistosoma mansoni*. Em colaboração com um pesquisador do Oxford Protein Production Facility (OPPF) localizado no Complexo de pesquisa de Harwell na Inglaterra, o cDNA correspondente a ADSL foi sintetizado, clonado em diversos vetores e a enzima recombinante foi expressa em *E. coli* Rosetta(DE3), purificada por afinidade em resina de níquel e posteriormente em coluna de exclusão molecular por tamanho. De posse da enzima pura, esta foi cristalizada em 10 condições do kit de cristalização Morpheus (C01, C05, D05, E08, E09, F09, G01, G05, G09 e H05). Já ADSL-AMP foi cristalizada em 5 condições do kit Index (D08, D09, D11, G09 e H08), 1 condição do kit JCSG-plus HT-96 (G10) e 18 condições do kit Morpheus (A05, C01, C09, D05, D08, D09, E05, E06, E09, F02, F04, F05, F08, G01, G05, G06, G09 e H09). Os cristais surgem rapidamente, em cerca de 1 dia, estes foram congelados e serão submetidos a difração de raio-X no síncrotron Diamond Light Source, visando a obtenção de um conjunto de dados de alta resolução que permita a determinação da estrutura tridimensional da enzima, bem como a identificação das melhores condições de cristalização dentre todas citadas que valem a pena serem otimizadas.

Palavras-chave: *Schistosoma mansoni*. Adenilosuccinato Liase . Cristalização .

Referências:

1 TOTH, E. A.; YEATES, T. O. The structure of adenylosuccinate lyase, an enzyme with dual activity in the de novo purine biosynthetic pathway. **Structure**, v. 8, n. 2, p.163-174, 2000.

PG157

Estrutura atômica de nanopartículas empregando o algoritmo Basin-Hopping Monte Carlo

Atomic structure of nanoparticles employing the Basin-Hopping Monte Carlo algorithm

RONDINA, Gustavo Garcia¹; DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira²

rondina@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Teoria e experimentos sugerem que nanopartículas (NPs) podem oferecer contribuições significativas para o desenvolvimento de novos materiais com propriedades específicas os quais podem ser empregados em catálise, abrindo assim novas possibilidades para uma vasta gama de aplicações tecnológicas. Contudo, ao contrário do que ocorre com materiais em bulk, no caso de NPs a identificação da estrutura atômica ainda é um desafio experimental devido às dificuldades inerentes ao acesso direto das suas estruturas atômicas, e.g., processos envolvidos na reconstrução de superfícies, falta ordenação de longo alcance e simetria reduzida. Nesse contexto os algoritmos de busca global são considerados uma das melhores abordagens para a compreensão da estrutura atômica de NPs. A maior dificuldade em encontrar a estrutura de estado fundamental de uma NP por meio de uma busca no espaço de configurações reside no fato da superfície de energia potencial (SEP) que descreve as possíveis configurações da NP conter um grande número de mínimos locais a serem explorados, portanto é imprescindível dispor de um algoritmo eficiente para a realização da busca. Um algoritmo que tem demonstrado sucesso na obtenção da estrutura atômica de NPs é o Basin-Hopping Monte Carlo (BHMC) no qual a exploração da SEP se dá por meio dos seus mínimos locais. Contudo, no caso de NPs inicializadas aleatoriamente, a aplicabilidade do BHMC tem sido restrita a sistemas pequenos descritos por potenciais empíricos. Neste pôster vamos apresentar propostas de melhorias para o BHMC as quais expandem sua aplicabilidade para NPs inicializadas aleatoriamente com centenas de átomos. Para avaliar essas sugestões foi desenvolvida uma implementação própria do BHMC que funciona tanto para sistemas descritos por potenciais empíricos i.e., Lennard-Jones (LJ) e Sutton-Chen (SC), quanto para sistemas descritos por métodos ab-initio levando em conta a natureza quântica da SEP, i.e., teoria do funcional da densidade (TFD) conforme implementada no pacote FHI-aims. (1) Para NPs LJ nós obtivemos com alta taxa de sucesso todos os mínimos globais putativos reportados (2) com tamanhos entre 2 e 147 átomos para sistemas unários, e entre 5 e 100 átomos para sistemas binários. Para o caso LJ unário com 75 átomos nossa implementação tem uma taxa de sucesso maior que qualquer outra reportada na literatura usando BHMC, e para sistemas binários LJ nós identificamos algumas estruturas de estado fundamental nunca antes reportadas. Para NPs LJ maiores (centenas de átomos) nós empregamos BHMC para identificar os mínimos globais putativos (3) com sucesso. Foram identificados também todos os mínimos globais (2) para NPs descritas pelo potencial SC na faixa de tamanhos entre 3 e 80, e também foram caracterizados os mínimos para NPs SC com tamanhos entre 81 e 147 átomos, nunca antes descritos na literatura. Para NPs descritas por TFD nós estudamos NPs Cu_n com tamanho entre 2 e 15 átomos e os resultados foram comparados com dados prévios obtidos pelo nosso grupo. Nossos resultados sugerem que as

melhorias propostas para o BHMC estão na direção correta e abrem possibilidade de novas aplicações mais interessantes, como NPs compostas por óxidos.

Palavras-chave: Otimização global. Nanopartículas. Modelagem estrutural.

Theory and experiments suggest that nanoparticles (NPs) can provide significant contributions to the designing of new materials with specific properties which can be employed in catalysis and thus opening new possibilities for a wide range of technological applications. In contrast with bulk materials, in the case of NPs the identification of the atomic structure is still a challenge due to the intrinsic difficulties in accessing their atomic structures directly, e.g., NPs surface reconstruction, no long range order and reduced symmetry. In this context global search algorithms have been considered as one of the most suitable approaches to obtain a better understanding of the atomic structure of NPs. The main hindrance in finding the ground state structure of a NP through a configuration space search lies in the fact that the potential energy surface (PES) which describes the allowed configurations of the NP contains a large number of local minima to be explored, therefore an efficient search algorithm is necessary. An algorithm that has been very successful in obtaining the atomic structure of NPs is the Basin-Hopping Monte Carlo (BHMC), in which the PES is explored through its local minima. Despite its success, in the case of unbiased randomly initialized NPs the BHMC has been restricted to small systems described by empirical potentials. In this poster we will present suggestions for bringing improvements to the BHMC which successfully extend its application to randomly initialized NPs with up to hundreds of atoms. In order to test our improvements we have developed our own BHMC implementation that works both for systems described by empirical potentials, i.e., Lennard-Jones (LJ) and Sutton-Chen (SC), and for systems described by ab-initio methods taking into account the quantum nature of the PES, i.e., density function theory (DFT) as implemented in the FHI-aims (1) package. For LJ NPs we have found with a high success rate all the putative global minima reported (2) with sizes from 2 up to 147 atoms for unary systems, and from 5 up to 100 atoms for binary systems. For the unary LJ case with 75 atoms our implementation yields a success rate which is higher than any other reported in BHMC literature, and for binary LJ systems we were able to identify a few new structures that have never been reported. For large LJ NPs (hundreds of atoms) we have successfully identified the putative global minima (3) using BHMC. We have also found all the global minima (2) for SC NPs from 3 to 80 atoms, and we also characterized the minima for SC NPs with sizes from 81 to 147 atoms, which have never been described in literature. For NPs described by DFT we have studied Cu_n NPs from 2 to 15 atoms and the results were compared with previous data obtained by our group. Our results suggest that our improvements to the BHMC are in the right direction and opens the possibility for new applications, such as large oxide NPs.

Keywords: Global optimization. Nanoparticles. Structural modeling.

Referências:

1 HAVU, V.; BLUM, V.; HAVU, P; SCHEFFLER, M. Efficient $O(N)$ integration for all-electron electronic structure calculation using numeric basis functions. **Journal of Computational Physics**, v. 228, n. 22, p. 8367-8379, 2009.

2 WALES, D. J.; DOYE, J. P. K.; DULLWEBER, A.; HODGES, M. P.; NAUMKIM, F. Y.; CALVO, F.; HERNANDEZ-ROJAS, J.; MIDDLETON, T. F. **The Cambridge cluster database**. Disponível em: <<http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>>. Acesso em: 18 ago. 2012.

3 XIANG, Y.; JIANG, H.; CAI, W.; SHAO, X. An efficient method based on lattice construction and the genetic algorithm for optimization of large Lennard-Jones clusters. **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 108, n. 16, p. 3586-3592, 2004.

PG158

Quando e como medidas de centralidade são correlacionadas em redes complexas

When and how centrality measures are correlated in complex networks

RONQUI, José Ricardo Furlan¹; TRAVIESO, Gonzalo¹

jose.ronqui@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com o desenvolvimento dos estudos na área de teoria de grafos e suas aplicações, várias métricas foram propostas para estimar a importância dos nós e a topologia da rede, além de suas características particulares. Muitas dessas métricas, atualmente denominadas medidas de centralidade, foram sugeridas por estudos na área das ciências sociais, pois era necessária uma boa caracterização das redes estudadas. (1) Como consequência uma gama de métricas foi desenvolvida com o objetivo de analisar diferentes características sobre a rede, entretanto a escolha de qual métrica ou combinação de métricas devem ser utilizadas para a caracterização da rede exige um amplo conhecimento sobre o sistema analisado, que em alguns casos pode ser inexistente. Motivados pela pouca quantidade de pesquisa sobre as interdependências entre as medidas de centralidade (2) e com o propósito de obter-se um melhor entendimento sobre estas, analisamos neste trabalho a correlação entre as medidas de centralidade, para redes sem direção reais e baseadas em conhecidos modelos teóricos. (3) Para tal análise utilizamos os coeficientes de correlação de Pearson e Spearman entre as medidas de centralidade. Os resultados obtidos indicam que nós de grau alto em modelos teóricos apresentam correlações entre algumas de suas medidas de centralidade, além disso notamos que em alguns casos, as correlações entre duas centralidades apresentavam um comportamento lei de potência, o que nos levou a calcular o expoente destas curvas, baseados nos valores calculados para as métricas das redes estudadas. Para redes reais entretanto, nossos resultados indicam que estas correlações são mais fracas ou inexistentes, demonstrando que nenhum dos modelos analisados representa bem este tipo de característica. Nos próximos trabalhos, pretendemos estender este estudo e analisar correlações entre medidas de centralidade de arestas tanto para modelos de rede teóricos quanto para redes reais.

Palavras-chave: Redes complexas. Correlação. Medidas de centralidade.

With the advances in graph theory and its applications, several measures were proposed to evaluate node significance, network topology and its particular features. Currently known as centrality measures, many of the ideas behind the centralities, were developed by studies in the social sciences, where a good characterization of the network is essential. (1) As a consequence, a series of measures considering different properties of the network were proposed. The choice of which centralities should be used for each network requires a thorough understanding about them, and sometimes this information isn't available. Encouraged by the lack of research on the interdependence among measures (2) and with the purpose of getting a better understanding about them, in this study we investigate the correlations between centralities in undirected

real networks and some theoretical models. (3) For such, we use the correlation coefficients of Pearson and Spearman among them. Our results showed that in theoretical networks some centralities are correlated and also that this correlation behaves as a power law, therefore we computed the coefficients, using the values obtained for the centralities of the studied networks. However our results also indicated that in real networks the correlations are weaker or even nonexistent, suggesting that, at least in the sense of interdependences among centralities, none of the theoretical models used in this study are a good representation of real networks. In future works, we intend to extend this study to correlations between edge centralities for both kinds of networks.

Keywords: Complex networks. Correlation. Centrality measures.

Referências:

- 1 NEWMAN, M. E. J. Measures and metrics. In: _____. **Networks: an introduction**. Oxford: Oxford University Press, 2010. cap. 7, p. 168-231.
- 2 LEE, C. Y. **Correlations among centrality measures in complex networks**. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/physics/0605220v1>>. Acesso em: 16 ago. 2012.
- 3 COSTA, L. F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G. ; VILLAS BOAS, P. R. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2007.

PG159

Simulação de efeitos quânticos relativísticos em armadilhas iônicas

ROSSETTI, Rafael Furlan¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

rafael.rossetti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Apresentou-se recentemente um protocolo para a simulação da equação de Dirac, além de efeitos quânticos relativísticos, tais como Zitterbewegung e paradoxo de Klein, através da física de interação radiação-matéria em armadilhas iônicas.(1) Essencialmente, o acoplamento do momento com o spin da partícula relativística, que decorre naturalmente do formalismo de Dirac, é simulado nas armadilhas iônicas pelo acoplamento do movimento vibracional do íon com os seus níveis eletrônicos, mediado por um campo de radiação clássico.(2) Além disso, o estado de superposição de energias positiva e negativa que no formalismo de Dirac introduz o movimento conhecido como Zitterbewegung, decorre no contexto dos íons armadilhados, da simultânea engenharia dos acoplamentos dos tipos carrier, blue e red sidebands.(3) Dentre os nossos objetivos, pretendemos simular o Zitterbewegung em eletrodinâmica quântica de cavidades. Para isso, devemos construir simultaneamente, interações do tipo Jaynes e anti-Jaynes-Cummings entre o átomo e um dado modo da cavidade, além de, necessariamente, levar em conta o grau de liberdade espacial do átomo durante sua passagem pela cavidade. Outra possibilidade consiste na análise do Zitterbewegung em cadeias de íons aprisionados. Neste caso deveremos analisar o Zitterbewegung quando acoplamos os graus de liberdade eletrônicos dos íons com diferentes modos normais da cadeia ou superposições destes. Por fim, objetivamos também analisar o Zitterbewegung, no contexto da física dos íons aprisionados, através da construção de interações dos graus de liberdade espaciais com os níveis eletrônicos que simulem acoplamentos do tipo spin-orbita da física dos estados sólidos.

Palavras-chave: Simulação da equação de Dirac. Zitterbewegung. Modelo de Jaynes-Cumming.

Referências:

- 1 SAKURAI, J. J. **Advanced quantum mechanics**. Boston: Addison Wesley, 1967. p. 75-122.
- 2 LAMATA, L.; LEON, J.; SCHÄTZ, T.; SOLANO, E. 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 GERRITSMA, R.; KIRCHMAIR, G.; ZÄHRINGER, F.; SOLANO, E.; BLATT, R.; ROOS, C. F. Quantum simulation of the Dirac equation. **Nature**, v. 463, n. 7277, p. 68-71, 2010.

PG160

Utilização da citometria de fluxo na investigação da distribuição de doses limiars de culturas de células da linhagem HEPG2

SABINO, Luis Gustavo¹; VOLLET-FILHO, José Dirceu¹; NOVAIS, Paulo César²; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹
lgsabino@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

A terapia fotodinâmica (TFD) é uma promissora terapia anticâncer. Na ação fotodinâmica, um grande número de fótons atravessa as células neoplásicas e é absorvido por moléculas de fotossensibilizador (FS) contidas nas células. (1,2) Os fótons que são absorvidos pelos FSs levam-os a interagir com o O² resultando em produção de espécies reativas de oxigênio (ROS), resultando em dano oxidativo. Este dano deve ser superior ao limiar de dose (D_{th}) em toda a lesão para eliminação completa da neoplasia. Na TFD, a resposta tumoral depende basicamente da farmacocinética do FS, da aplicação adequada da luz e da presença de O² em quantidades suficientes, para causar danos irreversíveis às células. (3) No entanto, levantou-se a possibilidade que a heterogeneidade celular tumoral, característica fundamental na progressão das neoplasias, seja um fator importante naqueles casos em que há maior resistência tumoral à TFD. Este estudo tem o objetivo de investigar a captação do FS (Photogem[®] - PG) por células de uma linhagem de hepatocarcinoma (HEPG2) in vitro, utilizando a técnica de citometria de fluxo, e verificar uma possível variação no valor do D_{th} a nível celular associada à captação de FS. Utilizou-se como modelo a cultura células da linhagem HEPG2, que apresenta muita semelhança aos hepatócitos, as células normais do fígado. No ensaio com citometria, utilizou-se o laser centrado em 488 nm para a excitação das amostras, e para a aferição da fluorescência do PG captado pelas células, utilizou-se o canal 670-725nm. Foram criados três grupos, todos em triplicata: o controle, que consistiu de culturas de células que não foram incubadas com o PG; o grupo ao qual foi adicionado PG na concentração de 5 µg/mL de meio de cultura (DMEM + soro fetal bovino - SFB 10%) por um período de 24 horas; e o grupo em que o PG foi adicionado em meio de cultura sem o SFB por um período de 24 horas. Em seguida, realizou-se outro ensaio mantendo-se a concentração de PG a 5 µg/mL, o tempo de incubação e variando-se a quantidade de células das culturas, também realizado em triplicata. Neste caso, os grupos de estudo foram seis: dois grupos controle que não receberam PG, um contendo 5x10⁴ células e o outro com 2x10⁵ células; e os grupos que receberam PG, o grupo contendo 5x10⁴ células, o grupo contendo 10⁵ células, o grupo contendo 1,5x10⁵ células, e o grupo contendo 2x10⁵ células. A análise dos dados foi realizada no software Origin 8.0. Considerando-se a relação direta de proporcionalidade entre a intensidade de fluorescência aferida na citometria para cada célula e a respectiva quantidade de PG captado pelas células HEPG2, podemos concluir que, mesmo para uma cultura celular in vitro que recebeu uma quantidade alta de PG, a captação do mesmo pode variar consideravelmente de uma célula para outra. Assumindo que o D_{th} seja um valor que depende da quantidade de PG presente nas células, pode-se afirmar que uma cultura celular apresenta uma distribuição de doses limiars.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Células tumorais. Distribuição de dose limiar.

Referências:

- 1 KUSHIBIKI, T.; SAKAI, M.; AWAZU, K. Differential effects of photodynamic therapy on morphologically distinct tumor cells derived from a single precursor cell. **Cancer Letters**, v. 268, n. 2, p. 244-251, 2008.
- 2 CASAS, A.; SANZ-RODRIGUEZ, F.; DI VENOSA, G.; PEROTTI, C.; MAMOME, L.; RODRIGUEZ, L.; SIMIAN, M.; JUARRANZ, A.; PONTIGGIA, O.; HASAN, T.; BATLLE, A. Disorganization of cytoskeleton in cells resistant to photodynamic treatment with decreased metastatic phenotype. **Cancer Letters**, v. 270, n. 1, p. 56,2008.
- 3 FERREIRA, J.; MORIYAMA, L.T.; KURACHI, C.; SIBATA, C.; SILVA, O. C. E.; ZUCOLOTO, S.; BAGNATO, V. S. Experimental determination of threshold dose in photodynamic therapy in normal rat liver. **Laser Physics Letters**, v. 4, n. 6, p. 469-475, 2007.

PG161

Geração de uma armadilha magneto-óptica de estrôncio

SALAS, Andres Rodriguez¹; COURTEILLE, Philippe Wilhelm¹

andresro@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho é apresentada a construção da montagem de um sistema experimental para resfriar átomos de estrôncio. A construção do sistema está focada no estudo do espalhamento coletivo em nuvens atômicas frias e ultrafrias por meio da teoria de Mie. O estrôncio é um elemento que conta com dois estágios de resfriamento, o primeiro utilizando a transição forte entre estados singletos $^1S_0 - ^1P_1$ com largura de $(2\pi)32MHz$, e o segundo com uma transição fraca entre estados singlete e tripleto $^1S_0 - ^3P_3$ com largura de $(2\pi)7.5MHz$. O objetivo deste trabalho é a construção do sistema para resfriar átomos de estrôncio utilizando a primeira transição. A construção do sistema se apresenta em várias partes, primeiro a construção do um forno como fonte de vapor de estrôncio, onde o estrôncio metálico é aquecido até uma temperatura $T = 873K$. O forno conta com um sistema de microtubos encarregados de colimar o feixe atômico, estes microtubos tem um diâmetro interno $D = 180\mu m$ e um comprimento de $d = 8mm$. Depois da implementação do forno e do sistema de microtubos foi medido o perfil de velocidades transversais e a divergência do feixe atômico que sai do forno. A largura tem um valor de $(2\pi)108MHz$ e a divergência do feixe de $\alpha = 4.12^\circ$. A segunda parte do sistema conta com a construção do desacelerador Zeeman, responsável por desacelerar os átomos do feixe atômico utilizando um feixe laser contrapropagante com comprimento de onda de $\lambda = 461nm$, circularmente polarizado e com uma dessintonização utilizada, após a caracterização do sistema foi de $(-2\pi)580MHz$. Os átomos sentiram os efeitos da força de pressão radiativa dentro de um tubo de comprimento de $d = 0.28m$. Para compensar o efeito Doppler causado pelo movimento dos átomos foi utilizado um arranjo de bobinas em configuração "spin flip" para gerar o campo. A terceira e principal parte do sistema foi a construção da armadilha magneto-óptica (AMO). Onde os átomos que saem do desacelerador Zeeman são confinados e resfriados pela combinação de seis feixes contrapropagantes, dos quais três são retro-refletidos utilizando a transição com largura de $(2\pi)32MHz$. A dessintonia dos feixe após da caracterização do sistema foi de $(-2\pi)39MHz$. Depois da construção do sistema foi feita a primeira caracterização da armadilha magneto-óptica de átomos de estrôncio em nosso grupo, onde obtivimos a temperatura dos átomos na armadilha para o eixo vertical da expansão foi de $T_{Vertical} = 4.7mK$ e para o eixo horizontal de $T_{Horizontal} = 4mK$. Também foi medido o tempo de carga dos átomos na armadilha $t_{carga} = 0.15s$ como bombeamento óptico de estado $^3P_2 - ^3D_2$. O tempo de vida foi de $t_{vida} = 0.3s$ e $t_{vida} = 0.03s$ com e sem bombeamento óptico, respectivamente.

Palavras-chave: Resfriamento de átomos. Estrôncio. Armadilha magneto-óptica.

Referências:

- 1 DE ESCOBAR, Y. N. M. et al. Bose-Einstein condensation of ^{84}Sr . **Physical Review Letters**, v. 103, n. 20, p. 200402, 2009. .
- 2 STELLMER, S. et al. Bose-Einstein condensation of strontium. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 20, p. 200401, 2009.

3 BIDEI, Y. **Piégeage et refroidissement laser du strontium**: etude de leet des interférences en diffusion multiple. 2001. 392 p. Ph. D. Thesis (Physics) - Université de Nice, Sophia Antipolis, 2001.

PG162

Integração numérica da equação de Langevin de transições de fase para o estado absorvente

SANTAMARIA, Julian Andres Jaimes¹; MAIA, Leonardo Paulo¹

julian@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Criticalidade Auto-Organizada (SOC) é um termo introduzido por Bak, Tang e Wiesenfeld (BTW) em 1987 (1), com o objetivo de explicar a grande variedade de sistemas que apresentam invariância de escala na natureza. Este comportamento livre de escala (assumido no começo como sinal de criticalidade) seria o resultado de um mecanismo genérico comum presente em todos os sistemas dinâmicos com muitos graus de liberdade que interagem entre si. Numa tentativa de explicar a origem da SOC, Dickman et al. (2), propuseram uma interpretação dela como uma transição de fase para um estado absorvente. O modelo mais simples que apresenta uma transição de fase para um estado absorvente é conhecido como percolação dirigida (Directed Percolation). A versão do modelo em espaço e tempo contínuo é feita através de uma equação de Langevin com ruído multiplicativo, na qual, a densidade de partículas é uma grandeza maior ou igual do que zero. Os algoritmos convencionais que tentam produzir soluções para equações diferenciais estocásticas não conseguem lidar com o fato da densidade ser sempre positiva, e novas formas de abordar o problema têm que ser procuradas. Neste trabalho explicamos um algoritmo que permite achar uma solução numérica à equação de Langevin com ruído multiplicativo, proposto em (3), e que consegue manter a densidade de partículas não negativa.

Palavras-chave: Equações diferenciais estocásticas. Criticalidade auto-organizada. Percolação.

Referências:

- 1 BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-organized criticality: an explanation of $1/f$ noise. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 4, p. 381-384, 1987.
- 2 DICKMAN, R.; MUÑOZ, M. A.; VESPIGNANI, A.; ZAPPERI, S. Paths to self-organized criticality. **Brazilian Journal of Physics**, v. 30, n. 1, p. 27-41, 2000.
- 3 DORNIC, I.; CHATE, H.; MUÑOZ, M. A. Integration of Langevin equations with multiplicative noise and the viability of field theories for absorbing phase transitions. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 10, p.100601-1-100601-4, 2005.

PG163

Imobilização da enzima glicose oxidase em filmes nanoestruturados para aplicação em biossensores

SANTOS, Jaciara Cássia de Carvalho¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

jaciaraacassia@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Aplicações de nanomateriais em biossensores têm recebido muito interesse nos últimos anos. (1-2) Biossensores de glicose, em particular, recebem destaque devido a sua importância em diagnósticos clínicos. Apesar do grande avanço no monitoramento de glicose nas últimas décadas, ainda há muitos desafios para alcançar um monitoramento de glicemia contínuo, clinicamente preciso, em conexão a um sistema fechado otimizado para a entrega de insulina no corpo. (3) Neste trabalho foram obtidos filmes automontados a partir da enzima glicose oxidase (GOx) e os polieletrólitos poli(amidoamina) de geração 4 (PG4) e o híbrido PG4 com as nanopartículas de ouro (AuNps). As AuNps foram sintetizadas em meio aquoso usando o dendrímero PG4, o ácido cloroáurico e ácido fórmico atuando como agente redutor. Os filmes foram analisados por caracterizações ópticas, estrutural e eletroquímica e adicionalmente foram testados para a atuação em biossensores de peróxido de hidrogênio e de glicose depositados sobre substratos de vidro recoberto com óxido de índio (ITO). A biofuncionalidade da GOx e a viabilidade do método como biossensor foi demonstrada pelo aumento da corrente em função das sucessivas adições de alíquotas de glicose à solução. Os filmes sem nanopartículas não foram sensíveis a glicose. O biossensor com melhor desempenho foi o ITO-(PG4AuNp-GOx) com 5 bicamadas, que mostrou-se linear na faixa de 0 a 4,8 mM de glicose com sensibilidade $0,013\mu\text{A}/\text{mM}$ e limite de detecção 0,44 mM.

Palavras-chave: Glicose oxidase. Técnica de automontagem. Biossensores.

Referências:

1 SIQUEIRA JUNIOR, J. R.; CASELI, L.; CRESPILO, F. N.; ZUCOLOTTO, V.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. Immobilization of biomolecules on nanostructured films for biosensing. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 25, n. 6, p. 1254-1263, 2010.

2 SPERLING, R. A.; RIVERA GIL, P.; ZHANG, F.; ZANELLA, M.; PARAK, W. J. Biological applications of gold nanoparticles. **Chemical Society Reviews**, v. 37, n. 9, p. 1896-1908, 2008.

3 WANG, J. Electrochemical glucose biosensors. **Chemical Reviews**, v. 108, n. 2, p. 814-825, 2007.

PG164

Base estrutural do dual agonista GL479 para os receptores nucleares PPAR α e PPAR γ .

SANTOS, Jademilson Celestino dos¹; NASCIMENTO, Alessandro Silva¹; POLIKARPOV, Igor¹
jademilsonsantos@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Receptores nucleares compreendem uma superfamília estruturalmente conservada de fatores de transcrição. Esta superfamília abrange 48 membros distintos, identificados no genoma humano. (1) A atividade de muitos destes receptores nucleares é controlada pela a ligação de ligantes lipofílicos, os quais incluem hormônios, ácidos graxos e seus metabólitos, ácidos biliares, oxisteróis, dentre outros ligantes. Em geral, esses receptores estão envolvidos em diversas funções fisiológicas, atuando como fatores de transcrição que regulam a expressão de genes específicos relacionados à reprodução, diferenciação e divisão celular, desenvolvimento e manutenção da homeostase. (2) Dentre os membros da superfamília dos receptores nucleares incluem-se os receptores ativados por proliferadores peroxissomais (PPARs), os quais estão divididos em três isotipos (α , β e γ). Estes receptores são ativados por ligantes, destacando-se os ácidos graxos de cadeia longa, fármacos hipolipidêmicos (fibratos) e tiazolidinadionas (rosiglitazona e pioglitazona), essa ativação regula a expressão de genes alvos pela ligação aos PPREs. Esses receptores formam heterodímeros com o receptor do ácido 9-cis retinóico (RXR). Em contraste com receptores de esteróides clássicos que atuam como homodímeros, a heterodimerização entre o receptor RXR e os PPARs é essencial para recrutamento de cofatores os quais podem iniciar o processo de transcrição quando recruta coativadores ou suprimir no caso do recrutamento de correpresores. (3) Neste trabalho, as proteínas foram purificadas em dois diferentes passos: primeiramente por uma cromatografia de afinidade seguida de uma gel filtração. Com as proteínas puras e concentradas a 10 mg/mL, o domínio LBD do PPAR α e PPAR γ foi incubado com o ligante GL479 derivado do fármaco gemfibrozil por 4 horas com 3 vezes de excesso molar do ligante. Para a cristalização utilizou-se a técnica de difusão de vapor, na qual a solução do poço continha 27% PEG 20000, 100 mM Tris-HCl pH 7.0 e 1.0M de citrato de sódio, 100 mM de Hepes pH 8.0, respectivamente para o PPAR α e PPAR γ . Os cristais cresceram após três dias em formas de agulhas para o PPAR α e na forma cúbica para o PPAR γ . Finalmente, os cristais foram coletas na linha dedicada à cristalografia de proteínas MX2 do LNLS, os dados provenientes da coleta foram processados no programa XDS e refinados no programa PHENIX.

Palavras-chave: PPARs. Dual agonista. Cristalografia de proteínas.

Referências:

- 1 ROBINSON-RECHAVI, M.; CARPENTIER, A. S.; DUFFRAISSE, M.; LAUDET, V. How many nuclear hormone receptors are there in the human genome? **Trends in Genetics**, v. 17, n. 10, p. 554-556, 2001.
- 2 ARANDA, A.; PASCUAL, A. Nuclear hormone receptors and gene expression . **Physiological Reviews**, v. 81, n. 3, p. 1269-1304, 2001.
- 3 KOTA, B. P.; HUANG, T. H.; ROUFOGALIS, B. D. An overview on biological mechanisms of PPARs. **Pharmacological Research**, v. 51, n. 2, p. 85-94, 2005.

PG165

Aspersão dinâmica em tempo real de glutamato à centros geradores de padrão

SANTOS, Jessica dos¹; PINTO, Reynaldo Daniel¹

jessicadsanti@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Centros geradores de padrão (CPGs) são redes neurais capazes de produzir atividades rítmicas sem receber informação extrínseca, além de possuírem a capacidade de fornecer *in vitro*, os mesmos padrões de um sistema *in vivo*. (1) Para estudar a ação de neuromoduladores em CPGs, muitos estudos utilizam a técnica denominada *bath*, a qual consiste em perfusão do sistema nervoso em solução contendo o neuromodulador por um período determinado e posterior lavagem. Entretanto, durante o funcionamento normal de um sistema nervoso, a maioria dos neurônios não é submetida a neuromodulação ou à aplicação estacionária de neurotransmissores. Cada sistema neural apresenta um padrão de pulsos de estímulo, formado de pequenas quantidades de substâncias liberadas de maneira descontínua e dependente do funcionamento do próprio circuito. Com o auxílio de um programa capaz de procurar por padrões de disparo dos neurônios, picolitros de solução contendo glutamato (10^{-3}) foram aspergidos com o auxílio de um *picospritzer*, o qual é acionado, em tempo real, assim que o padrão é encontrando. Análises preliminares apontam que, sendo o glutamato responsável por parte das sinapses inibitórias do CPG pilórico de crustáceos, seu efeito inibidor é muito mais forte quando a aspersão acontece em uma frequência de 1 Hz, do que quando a aspersão é dinâmica, dependente do 1º spike do neurônio LP. Nos primeiros 40 segundos após início da aspersão, a quantidade de disparos do *picospritzer* é praticamente a mesma nos dois casos, porém, a quantidade de spikes do LP é maior na aspersão dinâmica, caracterizando uma menor inibição pelo glutamato. Após a finalização de aspersões por um período de 3 minutos, em ambos os casos o sistema retoma, com a mesma velocidade (5 s), a frequência inicial (1.8 Hz), caracterizando um efeito reversível da inibição pelo glutamato. Tanto a aspersão dinâmica quanto a aspersão em uma frequência periódica estimularam a atividade de cardiac sac após o término da aspersão, porém, o início se dá mais rapidamente quando a aspersão é dinâmica. Nossos dados apontam que há uma diferença no efeito de neuromoduladores quando estes são liberados de acordo a atividade do próprio sistema nervoso ou quando a liberação é periódica, semelhante a utilizada na técnica *bath*, onde tem-se o efeito do acúmulo do neuromodulador. Estes resultados demonstram a viabilidade de utilizar o *picospritzer* para mimetizar a liberação de neuromoduladores em sistemas complexos.

Palavras-chave: Centros geradores de padrão. Neuromodulador. Aspersão dinâmica em tempo real.

Referências:

1 MARDER, E.; BUCHER, D. Central pattern generators and the control of rhythmic movements. **Current Biology**, v. 11, n. 23, p. R986-R996, 2001.

PG166

Identificação de novos moduladores demicrotúbulos para o tratamento do câncer

SANTOS, Ricardo Nascimento dos¹; FERNANDES, Daniara Cristina²; COELHO, Fernando²; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

rnsantos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

O câncer é uma doença devastadora caracterizada pelo crescimento e pela multiplicação descontrolada de células em um organismo. Apesar de todos os esforços nas últimas décadas em desenvolver um tratamento eficaz e seguro para combater o câncer, esta doença é a principal causa de morte em todo o mundo. Estima-se que em 2020 o número de novos casos anuais seja da ordem de 15 milhões. Dentre as diversas proteínas estruturais encontradas em eucariotos, os microtúbulos desempenham papel essencial no desenvolvimento e manutenção da estrutura celular, no transporte, nas vias de sinalização e no processo de mitose.(1) Desde a descoberta em 1971 do paclitaxel (taxol), um dos mais importantes fármacos para o tratamento do câncer até os dias de hoje, diversas classes de compostos que interferem com o processo de divisão celular pela interação com microtúbulos foram descobertos, variando quanto à forma de modulação e quanto aos sítios de ligação às unidades de tubulina.(2-3) Devido ao grande sucesso terapêutico dos fármacos anticâncer que interagem com este alvo molecular, considera-se que os microtúbulos representam o melhor alvo contra o câncer já descoberto e que ainda pode levar ao desenvolvimento de tratamentos terapêuticos mais eficazes pela identificação de novos fármacos mais seletivos.(1) Neste trabalho são apresentados os resultados obtidos através de estudos computacionais e bioquímicos utilizando uma base de compostos sintéticos. Estes estudos consistiram na triagem virtual por docagem molecular de compostos para avaliação em ensaios bioquímicos a fim de identificar possíveis moduladores da polimerização de tubulina com potencial atividade anticâncer. Todos os compostos disponíveis para testes bioquímicos foram organizados em uma base virtual pela construção e otimização conformacional das estruturas tridimensionais dos ligantes. A partir desta base, estudos de docagem molecular utilizando várias ferramentas computacionais em conjunto foram desenvolvidos e algumas moléculas foram selecionadas para avaliação bioquímica. Os compostos selecionados por triagem virtual foram avaliados em ensaios de polimerização de tubulina baseados em fluorescência e espalhamento e alguns destes compostos apresentaram considerável capacidade em modular a dinâmica dos microtúbulos. Estes compostos foram então avaliados de uma forma mais criteriosa através da determinação do parâmetro quantitativo de inibição *IC50* por curvas do tipo dose-resposta. A capacidade destes compostos em modular a polimerização foi então confirmada e um deles foi selecionado para estudos de competição frente ao sítio da colchicina, com o objetivo de determinar o mecanismo molecular responsável pela atividade do composto. Em conjunto, os resultados apresentados permitiram a identificação de duas novas classes de inibidores de polimerização de tubulina e auxiliarão no planejamento racional de novos compostos mais eficazes para o desenvolvimento de novos tratamentos terapêuticos no combate ao câncer.

Palavras-chave: Câncer. Microtúbulos. Inibidores.

Referências:

- 1 JORDAN, M. A.; WILSON L. . Microtubules as a target for anticancer drugs. **Nature Cancer Reviews**, v. 4, n. 4, p. 253-265, 2004.
- 2 ROWINSKY, E. K.; DONEHOWER, R. C. . Paclitaxel (Taxol). **New England Journal of Medicine**, v. 332, n. 15, p.1004-1014, 1995.
- 3 HAMEL, E. . An overview of compounds that Interact with tubulin and their effects on microtubule assembly. . In: FOJO, A. T. (Ed.) **The role of microtubules in cell biology, neurobiology, and oncology**. Totowa: Humana Press, 2008. cap. 1, p. 1-20 .

PG167

Identificação de lesões de melanoma em pele por análise de imagens

SBRISSA NETO, David Antonio¹; TRAVIESO, Gonzalo¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹
sbrissa@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O melanoma é um tipo de câncer que atinge o tecido epitelial e é a mais letal forma de câncer de pele. Diversas pesquisas sobre o melanoma vêm sendo realizadas, tanto na busca de novos tratamentos para câncer, bem como na prevenção e diagnóstico do mesmo. O presente trabalho tem como propósito a análise de imagens digitais obtidas por luminescência óptica na identificação e diagnóstico de melanoma. A motivação do projeto consiste em estabelecer procedimentos que possam facilitar o diagnóstico do melanoma sem a necessidade de um procedimento invasivo, agilizando a detecção do câncer e possibilitando maior sucesso no tratamento. A ideia principal do trabalho é analisar diversas características de imagens de melanomas e verificar quais são mais apropriadas para a classificação das lesões. Na fase inicial de projeto, trabalhou-se com o processamento de uma imagem de melanoma, onde foram implementadas rotinas para determinação de características simples da imagem como área, perímetro, borda, diâmetro entre outras. Observando imagens de melanomas, identificou-se que a forma da lesão é um fator importante na sua caracterização. Com base nisso, tem-se trabalhado, atualmente, na implementação de rotinas para a determinação da curvatura das imagens. A base teórica para tal é o cálculo de curvatura em curvas, sendo que as derivadas serão obtidas numericamente através da propriedade da transformada de Fourier (1). Espera-se, com tais resultados, obter informações das imagens que nos auxiliem na caracterização da mesma. O projeto é uma colaboração do Grupo de Computação Interdisciplinar e do Grupo de Óptica, ambos do Instituto de física de São Carlos.

Palavras-chave: Processamento de imagens. Reconhecimento de padrões. Melanoma.

Referências:

1 COSTA, L. da F.; CESAR JUNIOR, R. M. **Shape analysis and recognition**: theory and practice. 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2009.

PG168

Proposta de procedimento de alinhamento automático de sistemas ópticos por meio de frente de onda via polinômios de Zernike

SCADUTO, Lucimara Cristina Nakata¹; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹

lucimara@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Desalinhamentos sempre ocorrem em sistemas ópticos reais. Desalinhamentos não geram novas aberrações no sistema. O que efetivamente ocorre é que as aberrações já existentes no sistema óptico apresentam novas dependências com o campo de visada (1-2). Superfícies desalinhadas alteram não apenas suas características de aberração como alteram também as características das superfícies seguintes. Os métodos convencionais de alinhamento optomecânico nem sempre são suficientes para atingir a precisão de posicionamento entre os elementos ópticos. A medida da frente de onda de um sistema óptico permite obter informações quantitativas a respeito do estado físico de um sistema óptico, dentre eles do alinhamento. O uso dos coeficientes de Zernike obtidos a partir da frente de onda do sistema óptico tem sido proposto na literatura para o alinhamento de sistemas ópticos reflexivos com poucos elementos (3). O objetivo deste trabalho é desenvolver uma ferramenta para alinhamento fino de sistemas ópticos, baseado nos Polinômios de Zernike de modo a obter a distinção do tipo de desalinhamento presente no sistema óptico.

Palavras-chave: Alinhamento. Sistemas ópticos. Polinômios de Zernike.

Referências:

- 1 TESSIERE, R. **Analysis for alignment of optical systems**. 2003. 178 p. Ph.D. Thesis (Physics) - Departament of Optical Sciences, University of Arizona, Arizona, 2003.
- 2 SASIAN, J. How to approach the design of a bilateral symmetric optical system. **Optical Engineering**, v. 33, n. 6, p. 2045-2061, 1994. .
- 3 ALBUQUERQUE, B. C. F. et al . Misalignment parameters estimation in refractive optical systems. **Proceedings of SPIE**, v. 7068, p. 70680P, 2008.

PG169

Tomógrafo de espalhamento Compton para estudos da física de solos em ambiente de campo

SCANNAVINO JR., Francisco de Assis¹; CRUVINEL, Paulo Estevão²

scannavino@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação

A compactação de solos agrícolas causada por maquinários agrários ou pisoteio animal prejudica a produção agrícola porque dificulta a infiltração de água, causando a deficiência nutricional da planta e o aumento do escoamento superficial (erosão hídrica do solo). Uma ferramenta de grande valia na avaliação da compactação do solo é a tomografia por espalhamento Compton.(1) O trabalho de doutorado, ao qual esta monografia se refere, tem como objetivo geral desenvolver e construir um tomógrafo de efeito Compton para análise da densidade e compactação de solos agrícolas em ambiente de campo. Como objetivos específicos, o projeto inclui a elaboração de um programa que permite avaliar a provável quantidade de fótons espalhados por efeito Compton (2) e uma nova metodologia de medida em ambiente de campo que obtém a amostragem da região do solo através de uma tecnologia de detecção de fótons baseada na utilização de um detector de estado sólido.(3) Além do detector, o tomógrafo se constitui de uma fonte de raios X, de uma mesa posicionadora e de um computador portátil utilizado para o armazenamento das medidas e reconstrução das imagens através de um software, desenvolvido na Embrapa. Dentre os resultados preliminares, estão as medidas de obtenção de fotopicos Compton com o sistema de detecção por meio de detector de estado sólido e os resultados preliminares de reconstrução de imagens com o algoritmo de retroprojeção filtrada.

Palavras-chave: Tomografia Compton. Medida de compactação do solo. Física computacional.

Referências:

- 1 CRUVINEL, P. E.; BALOGUN, F. A. Minitomography scanner for agriculture based on dual-energy Compton scattering. In: BRAZILIAN SYMPOSIUM ON COMPUTER GRAPHICS AND IMAGE PROCESSING, SIBGRAPI, 13., 2000, Gramado. **Proceedings...** Los Alamitos: IEEE Computer Society, 2000. p. 193-199.
- 2 SCANNAVINO JR., F. A.; CRUVINEL, P. E. A graphical tool for an analytical approach of scattering photons by the Compton effect. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 674, p. 28-38, 2012. DOI:10.1016/j.nima.2011.12.120.
- 3 CRUVINEL, P. E.; SCANNAVINO JR., F. A.; LAIA, M. A. M. Instrumento para medida da compactação de solos agrícolas com uso de um detector de raios X de última geração. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA AGRÍCOLA, CONBEA, 41., 2012, Londrina. **Anais...** Jaboticabal: SBEA, 2012. 1 CD-ROM.

PG170

O algoritmo de Metropolis para o cálculo de integrais de trajetória

The Metropolis algorithm for evaluation of path integrals

SERENONE, Willian Matioli¹; MENDES, Tereza Cristina da Rocha¹; SLAPIK, Aleksandra²

willian.matioli@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²University of Silesia

A Integral de trajetória é uma entidade matemática usada em Teorias de Campos de Gauge tais como Eletrodinâmica Quântica (QED) e Cromodinâmica Quântica (QCD). Para a maioria dos sistemas físicos é impossível calcular a integral de trajetória analiticamente. Na QED este problema é resolvido aplicando teoria de perturbações, resultando nos Diagramas de Feynman. Isto é possível porque a constante de acoplamento eletromagnética α é menor que um. No entanto na QCD a constante de acoplamento forte α_s é maior que um no limite de baixos momentos (grandes distâncias). Isto significa que não podemos utilizar teoria de perturbação e a integral de trajetória tem de ser calculada numericamente. Aqui estudaremos um método de cálculo das integrais de trajetórias na formulação da mecânica quântica não relativística em termos de integrais de trajetória. Consideramos o problema de calcular a probabilidade de uma partícula partindo de um ponto A chegar a um ponto B em um tempo T sob a ação de um potencial $V(x)$. Isto é feito associando-se uma amplitude de probabilidade para cada possível trajetória e então somamos todas estas amplitudes (o que é a definição de integral de trajetória). O resultado é chamado de kernel e o módulo quadrado resultará na probabilidade procurada. (1) Se mudarmos para o tempo Euclidiano ($t \rightarrow it$) e discretizarmos o tempo, a integral se torna matematicamente a mesma usada em mecânica estatística para a função de partição. Isto significa que é possível utilizar algoritmos utilizados em mecânica estatística, como o algoritmo de Metropolis, para calcular integrais de trajetória. Para fins de testes estudamos o oscilador harmônico e usamos o método acima para calcular alguns observáveis como a energia do nível fundamental do sistema. O oscilador harmônico é uma boa escolha para a execução dos testes porque ele é um dos poucos sistemas com uma solução analítica. Prosseguimos então para o estudo do oscilador anarmônico, o qual não possui solução analítica (2) e estudamos os efeitos de diferentes escolhas de discretização da derivada temporal. (3)

Palavras-chave: Integral de trajetória. Algoritmo de Metropolis. Simulação de Monte Carlo.

The Path Integral is a mathematical entity used on Gauge Field Theories such as Quantum Electrodynamics (QED) and Quantum Chromodynamics (QCD). For most physical systems it is impossible to evaluate the path integral analytically. On QED this is solved through perturbation theory, resulting on the Feynman diagrams. This is possible because the electromagnetic coupling constant α is smaller than one. On QCD however the strong coupling constant α_s is bigger than one on the limit of low momentum (large distances). This means we cannot use perturbation theory and the path integral must be evaluated numerically. We study the method of evaluating the path integral on the simpler case of a path integral formulation

of non-relativistic quantum mechanics. We consider the problem of evaluating the probability of a particle leaving a point A arrive at point B in a time T under a potential $V(x)$. This is done by assigning a probability amplitude for each possible path and summing over these paths (which is the definition of a path integral). The resulting amplitude is called a kernel and taking the squared modulus of it will result on the desired probability. (1) If we move to the Euclidean time ($t \rightarrow it$) and discretize the time we will see the integral is mathematically the same as the one used on statistical mechanics for the partition function. This means it is possible to use algorithms from statistical mechanics such as the Metropolis algorithm to evaluate the path integral. We study for testing purposes the harmonic oscillator system, using the above method to evaluate some observable quantities such as the system ground state energy. The harmonic oscillator is a good choice for testing because it is one of the few systems that have an analytical solution. We proceed then to the study of the anharmonic oscillator which don't have an analytical solution (2) and to the study of the effects of different choices in the discretization of time derivatives. (3)

Keywords: Path integrals. Metropolis algorithm. Monte Carlo simulation.

Referências:

- 1 FEYNMAN, R. P.; HIBBS, A. R. **Quantum mechanics and path integrals**. New York: McGraw-Hill, 1965.
- 2 CREUTZ, M.; FREEDMAN, B. A statistical approach to quantum mechanics. **Annals of Physics**, v. 132, n. 2, p. 427-462, 1981.
- 3 VERSTEGEN, D. Harmonic oscillator with discrete time. **Physics Letters B**, v. 122, n. 1, p. 63-67, 1983.

PG171**Complexos macromoleculares da via específica de incorporação de selênio de *Escherichia coli*****Macromolecular assemblies of selenium incorporation specific pathway in *Escherichia coli***

SERRÃO, Vitor Hugo Balasco¹; MANZINE, Livia Regina¹; SILVA, Ivan Rosa e¹; BETTINI, Jefferson²; PORTUGAL, Rodrigo Villares²; VAN HEEL, Marin³; THIEMANN, Otavio Henrique¹

vitor.serrao@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²LNNano - CNPEM

³Imperial College - UK and Leiden Universiteit - Netherlands

A presença de complexos macromoleculares em vias metabólicas não é uma novidade visto a necessidade de formação de interações transientes para a formação de sítios ativos ou mesmo para entrega de elementos com elevada toxicidade celular. Um dos elementos com elevado grau prejudicial à células é o Selênio. Como controle desse elemento dentro do ambiente celular, a via de incorporação de selenocisteínas possui papel fundamental à sobrevivência principalmente aos organismos unicelulares de vida livre. (1) Em *Escherichia coli*, a via possui um complexo homodecamérico (SELA) que é responsável pela incorporação do átomo de selênio, entregue pela enzima SELD, ao tRNA específico (SELC) para sua futura incorporação na cadeia polipeptídica nascente. (2) Esse projeto tem como objetivo a compreensão da interação entre SELA e SELC, e, posteriormente, do complexo ternário SELA-SELC-SELD através de técnicas não usuais para as dimensões dos complexos em análise. As metodologias de anisotropia de fluorescência e técnicas microcalorimétricas apontam para razão estequiométrica de 10SELA:10SELC na formação do complexo mais estável e razão final de 1SELA:1SELC:1SELD. (3) O mapeamento de regiões de interação foram realizadas através de troca hidrogênio - deutério acoplada à espectrometria de massas, possibilitando a construção de um modelo teórico. O qual foi comprovado através de medidas de microscopia eletrônica de transmissão utilizando contraste negativo e preparo criogênico para determinação estrutural em alta resolução. Além da possibilidade de quantificar a dinâmica da interação em solução por espectroscopia de infravermelho. Os resultados obtidos evidenciam a possibilidade de determinação para complexos imensos por técnicas não usuais, além de se contrapor à resultados bibliográficos postulados à décadas e favorecer a compreensão da via, tornando-a comparável com a mesma via homóloga em organismos superiores amplamente estudadas.

Palavras-chave: Selenocisteína. Complexos macromoleculares. Microscopia eletrônica.

The presence of macromolecular complexes in metabolic pathways is not a new since the need for formation of transient interactions to form active sites or for delivery of items with high toxicity to cells. Selenium is the highly damaging to the cell. (1) As control of this element within the cellular environment, the selenocysteine incorporation has key role to survival

mainly to free-living unicellular organisms. (2) In *Escherichia coli*, the pathway has a homodecamer complex (SELA) which is responsible for the incorporation of the selenium atom, delivered by the enzyme SELD, and the tRNA specific (SELC) for future incorporation into the nascent polypeptide chain. This project aims at understanding the interaction between SELA and SELC, and later, the ternary complex SELA-SELC-SELD through of unusual analysis techniques for the dimensions of complex. (3) The methods of fluorescence anisotropy and techniques of micro calorimetric indicate stoichiometric ratio of 10SELA:10SELC in complex formation and more stable final ratio of 1SELA:1SELC:1SELD. To mapping regions of interaction were performed by exchange hydrogen - deuterium coupled with mass spectrometry, allowing the construction of a theoretical model. Which was confirmed through measurements of transmission electron microscopy using negative stain and cryogenic preparation for high resolution structural determination. Besides the possibility of measuring the dynamic interactions in solution by IR spectroscopy. The results showed the possibility of determination for complex techniques, and to counteract the results bibliographic postulated for decades, and promote understanding of the track, making it compatible with the homologous pathway extensively studied in higher organisms.

Keywords: Selenocysteine. Macromolecular assemblies. Electron microscopy.

Referências:

- 1 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.
- 2 KAISER, J. T.; GROMADSKI, K.; ROTHER, M.; ENGELHARDT, H.; RODNINA, M. V.; WAHL, M. C. Structural and functional investigation of a putative archaeal selenocysteine synthase. **Biochemistry**, v. 44, n. 40, p. 13315-13327, 2005.
- 3 PALIOURA, S.; SHERRER, R. L.; STEITZ, T. A.; SÖLL, D.; SIMONOVIC, M. The human SepSecS-tRNA^{Sec} complex reveals the mechanism of selenocysteine formation. **Science**, v. 325, n. 5938, p. 321-325, 2009.

PG172

Determinação da estrutura e função da uridina fosforilase de *Schistosoma mansoni*

SILVA NETO, Antônio Marinho da¹; TORINI, Juliana Roberta¹; ROMANELLO, Larissa¹; CASSAGO, Alexandre¹; DE MARCO, Ricardo¹; BRANDÃO NETO, José²; GARRATT, Richard Charles¹; D'MUNIZ, Humberto Pereira¹
amarinho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Diamond Light Source

A esquistossomose é uma das doenças tropicais negligenciadas de maior incidência no mundo, estima-se que atinja cerca de 210 milhões de pessoas em 76 países. (1) O único tratamento eficaz disponível baseia-se na utilização de praziquantel. (2) No entanto, existem relatos de falhas de tratamento e o surgimento de cepas de schistossomas resistentes. (3) Por esta razão, se faz necessário a busca de novas alternativas de conduta terapêutica. A Uridina Fosforilase (UP) é uma enzima que cataliza a fosforilação reversível da uridina formando uracil e ribose-1-fosfato. Esta enzima possui um papel importante no metabolismo de pirimidinas e já se mostrou um alvo terapêutico promissor para vários parasitas, incluindo *Schistosoma mansoni*. Em trabalhos anteriores do grupo, duas isoformas da UP de *S. mansoni* foram identificadas, Smp_082420 (DL) e a Smp_082430 (GQ), e seus produtos polipeptídicos possuem 91% de identidade. A análise da estrutura cristalográfica da isoforma QG revelou que esta isoforma apresenta mutações (D126G e L201Q) no sítio ativo e podem significar importantes diferenças na função entre estas isoformas. O gene da isoforma QG e DL foram clonados, em vetor de propagação e de expressão, e cristalizadas. Durante a obtenção destas isoformas foram sequenciadas 72 colônias. Destas, 90% correspondem a forma DL e apenas 10% a forma GQ. Este dado indica a preferência do parasita pela forma DL. Atualmente temos obtidas e refinadas as estruturas das duas isoformas com diferentes ligantes. A análise das estruturas, estudos *in silico* e de cinética enzimática irão auxiliar a determinar as diferenças nas constantes catalíticas e preferências de substrato destas isoformas.

Palavras-chave: Uridina fosforilase. *Schistosoma mansoni*. Cristalografia.

Referências:

- 1 STEINMANN, P.; KEISER, J.; BOS, R.; TANNER, M.; UTZINGER, J. Schistosomiasis and water resources development: systematic review, meta-analysis, and estimates of people at risk. **Lancet Infectious Diseases**, v. 6, n. 7, p. 411-425, 2006.
- 2 CAFFREY, C. R. Chemotherapy of schistosomiasis: present and future. **Current Opinion Chemical Biology**, v. 11, n. 4, p. 433-439, 2007.
- 3 SILVA, I.M.; THIENGO, R.; CONCEICAO, M. J.; REY, L.; LENZI, H. L.; PEREIRA FILHO, E.; RIBEIRO, P. C. Therapeutic failure of praziquantel in the treatment of *Schistosoma haematobium* infection in Brazilians returning from Africa. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 100, n. 4, p. 445-449, 2005.

PG173

Inativação fotodinâmica dos fungos causadores da onicomicose

SILVA, Ana Paula¹; KURACHI, Cristina¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; INADA, Natalia Mayumi¹

paulalsir@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A onicomicose é um tipo de infecção causada por fungos dermatófitos, bolores filamentosos não dermatófitos e leveduras, como *Trichophyton spp.*, *Pitiríase versicolor* e *Candida spp.* entre outros. (1) A infecção caracteriza-se por unhas quebradiças, espessadas, despigmentadas ou com excesso de pigmentação e sem brilho. Estima-se que cerca de 80 % da população possui a doença e apenas uma pequena parcela apresenta resultado satisfatório com os tratamentos disponíveis. O tratamento convencional consiste na administração sistêmica de antifúngicos e antibióticos por períodos de até 24 meses. (2) O aumento de linhagens microbianas resistentes às drogas disponíveis e a alta incidência deste tipo de infecção na população tornam importante o desenvolvimento de novas tecnologias e opções terapêuticas. Esta pesquisa tem a parte básica (estudos *in vitro*) e aplicada (estudo clínico), além do desenvolvimento de equipamento para o tratamento da onicomicose por Terapia Fotodinâmica (TFD). A TFD consiste no emprego do composto fotossensibilizador ativado por luz em comprimento de onda adequado que, na presença de oxigênio, produz espécies reativas de oxigênio tóxicas que inativam as células alvo (fungos e bactérias). (3) Nos ensaios *in vitro* utilizamos um dos principais fungos causadores da onicomicose, o *Trychophyton mentagrophytes* e dois fotossensibilizadores diferentes: Curcumina (PDTPharma Ltda., Cravinhos-SP, Brasil) e Photogem[®] (Limited Liability Company Photogem, Moscow, Russia) onde analisamos por microscopia confocal o tempo de incubação dos fotossensibilizadores nos fungos e a fração de sobrevivência do micro-organismos para os diversos parâmetros avaliados. Para os estudos clínicos foram desenvolvidos dois equipamentos emitindo em 630 nm, para o Photogem[®] e em 470 nm, para a curcumina. Os equipamentos foram desenvolvidos no IFSC (Grupo de Óptica, Laboratório de Apoio Tecnológico) e consiste de LEDs (diodos emissores de luz) acoplados a presilhas anatomicamente desenhadas para as unhas dos pés e das mãos. Foram tratados 90 pacientes com Photogem[®] (5 mg/ml) e curcumina (750 µg/ml) aplicados topicamente. Após 1 hora, confirmamos a presença do fotossensibilizador por imagem de fluorescência e o local foi iluminado por 20 minutos (fluência de 120 J/ cm²). Nova avaliação clínica foi realizada após sete dias e o acompanhamento do tratamento foi realizado tanto por imagens, como por exames laboratoriais. Até o momento observou-se cura de 30 pacientes com uma média de seis meses de tratamento. O grupo tratado com curcumina apresentou melhores resultados em um tempo menor que o grupo Photogem[®]. Em comparação aos tratamentos convencionais, que chegam a durar 24 meses, a TFD apresenta resultados mais rápidos, sem recidivas. Além disso, o baixo custo do equipamento desenvolvido, a aplicação local, evitando efeitos adversos do medicamento convencional oral e a simplicidade de operação são fatores relevantes para a garantia da implantação dessa tecnologia no tratamento de um problema tão comum. Este protótipo se encontra em desenvolvimento por uma empresa nacional que o lançará com o kit contendo o medicamento, no início de 2013. Com os resultados obtidos concluímos que a terapia fotodinâmica é uma importante ferramenta no tratamento da onicomicose.

Palavras-chave: Terapia fotodinamica. Micro-organismos. Onicomicose.

Referências:

- 1 SIDRIM, J. J. C.; MOREIRA, J. L. B. **Dermatofitose:** fundamentos clínicos e laboratoriais da micologia médica. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 1999. cap. 10, p.107-131.
- 2 ELEWSKI, B.E. Clinical pearl: diagnosis of onychomycosis. **Journal of the American Academy of Dermatology**, v. 32, n. 3, p. 500-1, 1995.
- 3 INADA, N. M. et al. Photodiagnosis and treatment of Condyloma acuminatum using ALA and homemade devices. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, 2011. In press.

PG174

Espectroscopia por Ressonância Magnética resolvida no tempo através do método FDM

SILVA, Cíntia Maira Pereira¹; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; MAGON, Cláudio José¹; PAIVA, Fernando Fernandes¹; TANNÚS, Alberto¹
cintia.maira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O Método de Diagonalização Filtrada (FDM) é aplicado como um método alternativo em análise de sinais, principalmente em situações onde a Transformada de Fourier (FT) sofre alguma limitação, como em sinais temporais truncados ou quando ocorre superposição de FID e eco e se torna necessário separar essas informações(1). Considerando o número de médias necessárias à aquisição de um dado com suficiente relação sinal-ruído (SNR), o tempo de repetição (TR) adotado nas sequências e, por consequência, os parâmetros associados à resolução espectral normalmente estão bem abaixo do necessário para resolver multipletos. Isso compromete significativamente a quantificação de metabólitos clinicamente importantes como o Myo-Inositol (M-Ins), por exemplo, cujo espectro apresenta múltiplas linhas. Outra limitação associada à restrição de TR mínimo é a dificuldade de estabelecer experimentos in vivo para a análise da variação dinâmica de metabólitos em pesquisas de caráter funcional, uma vez que estas variações ocorrem numa duração inferior àquela admitida pela resolução máxima permitida pelo uso do formalismo de Fourier. Portanto, a fim de avaliar a eficiência do processamento utilizando FDM comparado à técnica tradicional, FT, em MRS de ¹H, observando a resolução espectral obtida, simulamos neste estudo o metabólito M-Ins, que não é facilmente resolvido quando obtido em sistemas clínicos convencionais e processados utilizando FT. Os espectros do metabólito M-Ins foram simulados utilizando o software jMRUI 5.0. Esses espectros foram simulados a partir das constantes de acoplamento (J) já previamente estimadas pela literatura para o metabólito de interesse(2). Nas simulações, foi utilizada a sequência PRESS, com TE=32ms, e a frequência de transmissão de 85,2411MHz. Foram simulados dois espectros 1D do metabólito M-Ins, um com 1000 e outro 2048 pontos, sempre mantendo a banda espectral constante e igual a 2kHz. Para as simulações, foi considerado o T₂ do M-Ins igual a 150ms. Os espectros simulados foram processados utilizando FT e FDM. No caso da FT foi utilizado o algoritmo padrão presente Origin 8.5.1. Já o processamento utilizando FDM foi realizado com auxílio de um plug-in implementado localmente no ambiente do Origin(1). Com a finalidade de comparar os métodos, graficou-se a FT do FID completo, 2048 pontos, e o FDM do FID truncado nos 1000 pontos iniciais. Como o processamento por FDM possibilita manipular parâmetros dos picos que compõem o espectro(3), a largura total a meia intensidade (FWHI) foi reduzida a 25% em todos os picos para evidenciar a informação presente no sinal. Isto possibilitou resolver e visualizar melhor os multipletos, que a FT, não permitia, como por exemplo, o duplo dubleto que está centrado em 3.52 ppm e o tripleto em 4.05 ppm. Os resultados iniciais demonstram que a técnica FDM é bastante promissora para o processamento de espectros obtidos utilizando MRS. Em dados simulados, a técnica apresentou, de forma comparativa, uma resolução espectral melhor que a FT, além de possibilidades distintas e interessantes de processar e visualizar os picos. A resolução de espectros com tempo total de aquisição comparável ou inferior à variação metabólica funcional é um desafio. Entretanto, nossos resultados sugerem que essa dificuldade em breve será superada.

Palavras-chave: Método de diagonalização filtrada (FDM) . Espectroscopia por ressonância magnética (MRS). Simulação jMRUI.

Referências:

- 1 MORAES, T. B. **O Método da diagonalização filtrada (FDM) e suas aplicações para a ressonância magnética**. 2011. 87 p. Dissertação (Mestrado em Ciência - Área de concentração: Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.
- 2 GOVINDARAJU, V.; YOUNG, K.; MAUDSLEY, A. A. Proton NMR chemical shifts and coupling constants for brain metabolites. **NMR in Biomedicine**, v. 13, n. 3, p. 129-153, 2000.
- 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.

PG175

Recorrência de sintons supramoleculares em cocristais de 5-fluorocitosina com ácidos dicarboxílicos

SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da¹; PEPINO, Rebeka de Oliveira¹; ELLENA, Javier Alcides¹
cecycarol@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Flucitosina (5FC) é um fármaco antimetabólito, utilizado no tratamento de infecções causadas por fungos. Seu mecanismo de ação consiste na deaminação da molécula de 5FC em 5fluorouracila (5FU), que possui um átomo de oxigênio no lugar do grupo amina, sendo tal mecanismo executado pela enzima citosina deaminase(CD), naturalmente presente nas células de fungos.(1) A 5FU, por sua vez, trata-se de um potente fármaco antimetabólito, altamente tóxico, utilizado no tratamento do câncer, em especial os de cólon, gástrico, reto, mama, cabeça e pescoço, cervical, pâncreas, células renais, etc.(2) Em 1985, por meio da terapia dirigida por gene-enzima-pró-fármaco, a 5FC foi introduzida em combinação com a CD para o tratamento do câncer.(1) Considerando que fármacos antimetabólitos atuam inibindo a função normal de processos biossintéticos, é de grande importância compreender a química supramolecular desses compostos, uma vez que o reconhecimento molecular depende dessas características para realizar um processo inibitório eficiente e seletivo. Nesse estudo, três cocristais de 5-FC com os ácidos adípico, succínico e tereftálico foram obtidos de acordo com o estudo de predição de sais ou cocristais a partir da variação do pKa.(3) Todos os cocristais cristalizam no grupo especial triclinico P-1, com uma molécula de 5FC e uma molécula de ácido por unidade assimétrica. Dois arranjos do tipo R22(8) são observados em todas as estruturas cristalinas, formadas por ligações de hidrogênio complementares dos tipos NHO e NHN, ocorrendo entre moléculas adjacentes de 5FC. Um arranjo R33(8), envolvendo ligações de hidrogênio dos tipos NHO e OHO são observadas em ambos os lados das moléculas de ácido, conectando-os à molécula de 5FC. Essas interações intermoleculares resultam em *sintons* supramoleculares similares para as três estruturas, com geração de cavidades repetitivas de arranjo R45(40), conduzindo à formação de camadas. É válido ressaltar que o tamanho dessas cavidades é proporcional ao tamanho da molécula do ácido. Além disso, interações intermoleculares não-clássicas dos tipos CHF, CHO e CHN também estão presentes, sendo as responsáveis pelo empilhamento das camadas adjacentes em todas as estruturas. A semelhança dos *sintons* supramoleculares observados para cada estrutura apresentada nesse estudo indica que novos cocristais da fluoropirimidina 5FC com outros ácidos dicarboxílicos podem ser desenhados e obtidos, podendo-se prever sua arquitetura tridimensional. Isto permitiria a aplicação de técnicas de engenharia de cristais para o desenho de cocristais deste insumo farmacêutico com propriedades farmacocinéticas melhoradas. Neste caso específico, visando a seleção de uma alternativa com propriedades melhoradas para a utilização da 5FC.

Palavras-chave: 5-fluorocitosina. Cocrystal. Sinton supramolecular.

Referências:

1 HULME, A.T.; TOCHER, D.A. The discovery of new crystal forms of 5-Fluorocytosine consistent with the results of computational crystal structure prediction. **Crystal Growth and Design**, v. 6, n. 2, p. 481-487, 2006.

2 KIM, K.; KIM, J.; LEE, K.; NOH, M.; KIM, Y.; PARK, H. Synthesis and biological activity of the new 5-fluorocytosine derivatives, 5-deoxy-N-alkyloxycarbony-5-fluorocytosine-5-carboxylic acid. **Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters**, v. 12, n.3, p. 483-486, 2002.

3 CHILDS, S.L.; STAHL, G.P.; PARK, A. The Salt-Cocrystal continuum: the Influence of crystal structure on ionization state. **Molecular Pharmacology**, v. 4, n.3, p. 323-338, 2007.

PG176

Console multiplataforma para medidas de relaxometria em espectrômetro digital de ressonância magnética

SILVA, Danilo Mendes Dias Delfino¹; LOURENÇO, Gustavo Vilaça¹; FREIRE, Guilherme¹; COELHO, Felipe Bessa¹; PIZETTA, Daniel Cosmo¹; MARTINS, Mateus José¹; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; TANNÚS, Alberto¹
danilomendes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

As técnicas de ressonância magnética apresentam um papel importante em diversas áreas do conhecimento devido a algumas características fundamentais em certas aplicações, como, por exemplo, não ser invasiva ou destrutiva. No entanto, estudos sobre a difusão e incorporação da tecnologia de ressonância magnética no Brasil demonstraram que a participação do país é consideravelmente baixa em relação aos países desenvolvidos. No período de 1976-2006, apenas 1% dos artigos publicados nas bases de dados do *Institute for Scientific Information* são brasileiros e apenas uma patente brasileira foi registrada nas bases de dados do *Trademark Office USPTO*.(1) Sendo assim, os equipamentos de RMN utilizados no país são sistemas proprietários de grandes empresas e possuem altíssimo custo. Neste sentido, trabalhos estão sendo desenvolvidos no CIERMag, para a criação de um tomógrafo completamente digital de ressonância magnética (Projeto ToRM15), com concepção completa e proprietária do grupo. Este trabalho tem por finalidade descrever parte do sistema que compõe o Projeto ToRM15, o *ToRM Console*, ainda em sua fase de concepção e desenvolvimento. Na atual etapa, o *ToRM Console*, permite a execução de experimentos de relaxometria, que estão sendo utilizados para validação do *hardware* sintetizado no CIERMag. Em longo prazo, o sistema deverá também permitir a realização de experimentos de MRI e exames clínicos, de maneira robusta. Além disso, outros trabalhos desenvolvidos no grupo, como uma linguagem para definição de sequências de pulsos (Linguagem F), bem como um ambiente para desenvolvimento (*ToRM IDE*) garantem o funcionamento do sistema. O *ToRM Console* está sendo desenvolvido em linguagem de programação *Python 2.7*, com o uso da biblioteca *PySide*, que permite a utilização do *framework* de interface de usuário multiplataforma *Qt*, de maneira a criar um ambiente com boa usabilidade, portabilidade e sem grandes desafios durante a etapa de codificação.(2) Para garantir a proteção do sistema em relação à utilização das funcionalidades, um sistema de usuários foi estabelecido e já está funcionando. Este sistema garante que cada grupo de usuários possa realizar somente as operações atribuídas a ele. Para que uma metodologia de sequência de pulsos previamente desenvolvida seja utilizada no sistema, o usuário deverá carregá-la, verificar os valores dos parâmetros utilizados na sequência e executá-la. O sistema automaticamente se encarregará de compilar a metodologia, bem como realizar a comunicação com o *hardware* do espectrômetro, disponibilizando, em tempo real, os dados coletados de forma gráfica. A arquitetura cliente-servidor utilizada no sistema permite que experimentos sejam realizados remotamente, podendo ser utilizados para fins educacionais ou prestação serviços à distância, por exemplo. Para fins de validação, um experimento utilizando uma metodologia de sequência de pulsos CPMG, de 32 ecos, 128 pontos por eco, em uma amostra de água com sulfato de cobre a 5mM foi realizado. Embora as ferramentas de processamento ainda não estejam suficientemente desenvolvidas, os resultados foram interessantes do ponto de vista da validação do *hardware*, bem como para observar a viabilização do projeto. Agrade-

ceamos a toda equipe do CIERMag, além das agências de fomento tecnológico pelo apoio ao projeto (FAPESP: 2005/5.6663-1 e CNPQ: 565.047/2010-8, CAPES, FINEP, FNS).

Palavras-chave: Instrumentação para RM. Software Multiplataforma. Relaxometria de RM.

Referências:

1 ANDRADE, E. I. G. et al. Análise da evolução do conhecimento e da difusão e incorporação da tecnologia de ressonância magnética no Brasil. In: BRASIL.Ministerio da Saude.**Avaliação de tecnologias em saude**:seleção de estudos apoiados pelo DECIT. Brasilia:2011. p.23.

2 PYSIDE - Python for Qt. Disponível em: <http://qt-project.org/wiki/PySide_FAQ>. Acesso em: 19 ago.2012. .

PG177

Redes complexas geográficas multidimensionais

SILVA, Filipi Nascimento¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

filipinascimento@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Rede complexas(1) são uma forma de representação de sistemas complexos onde as interações entre elementos tem um papel fundamental para sua descrição. Recentemente, estudos em redes complexas apresentaram grande potencial para entender a estrutura e dinâmica de sistemas em diferentes áreas do conhecimento. Uma rede complexa é composta por um conjunto de vértices e arestas. Vértices podem representar elementos como partículas, pessoas e proteínas; enquanto arestas, podem representar as conexões ou relações entre eles, como a interação entre partículas, a amizade entre pessoas e semelhança entre proteínas. A obtenção de modelos quantitativos que representem fenômenos reais, observados na natureza, assim como o desenvolvimento de metodologias de caracterização de redes complexas, tornaram-se essenciais para a compreensão e desenvolvimento de pesquisas com essas estruturas. A estrutura topológica de certas redes pode estar acoplada a informações geográficas ou espaciais inerentes do fenômeno ou modelo estudado. Essas redes são chamadas de redes geográficas ou redes espaciais, onde a distancia euclidiana entre vértices possui papel fundamental na descrição de suas conexões. Redes geográficas baseadas em transporte podem fornecer informações quantitativas importantes sobre planejamento urbano. Apesar da maioria das redes espaciais estudadas serem geográficas bidimensionais, redes tridimensionais podem ser obtidas através da análise da estrutura inerente de canais em sólidos. Redes espaciais reais com dimensão maior do que 3 foram pouco exploradas como redes geográficas. Um exemplo dessa classe de redes são redes de paisagens de energia potencial (Energy Landscapes). (2) Estas redes descrevem a estrutura topológica intrínseca de mínimos na hiper-superfície gerada por um potencial de energia n-dimensional e podem ajudar a entender melhor os mecanismos complexos que levam à minimização de energia em diferentes sistemas físicos, como dobramento de proteínas, dinâmica nuclear e descrição de potenciais quânticos. Assim como paisagens de energia, paisagens de aptidão (Fitness Landscapes) são superfícies n-dimensionais, entretanto mapeiam uma pontuação de fitness para cada variável de sistema. Nestes sistemas, deseja-se maximizar o score, diferentemente de superfícies de energia, onde o sistema tende a minimizar a energia. Paisagens de aptidão podem ser usadas para entender a evolução de uma população com relação a uma característica, em biologia, por exemplo, o sistema pode ser descrito por genótipos e fenótipos. A proposta deste trabalho é explorar as possibilidades de estudo de redes complexas geográficas de dimensionalidade arbitrária, e, inicialmente, estudar a aplicação de novas metodologias para a análise de redes de potencial. Dada a importância de otimização em diferentes áreas do conhecimento, redes de potencial podem ser úteis para descobrir estratégias de solução para problemas que minimizem ou maximizem uma função de energia. A estrutura topológica de redes geográficas também deverá ser estudada, tendo como maior contribuição apresentar o conceito de dimensionalidade(3) local para vértices. Metodologias de visualização computacional também deverão ser aplicadas às redes, tendo como objetivo tanto validar os novos métodos como também permitir que dados multidimensionais sejam apresentados em baixas dimensões. Como objetivo final, este trabalho deverá motivar estudos futuros de redes com alta dimensionalidade destacando as possíveis aplicações e importância.

Palavras-chave: Redes complexas. Redes geográficas. Visualização computacional.

Referências:

- 1 NEWMAN, M E. J. The structure and function of complex networks. **Siam Review**, v. 45, n. 2, p.167-256, 2003.
- 2 MASSEN, C. P.; DOYE J. P. K. Power-law distributions for the areas of the basins of attraction on a potential energy landscape. **Physical Review E**, v. 75, n. 3, p.037101,2007.
- 3 DAQING, L.; KOSMIDIS, K.; BUNDE, A.; HAVLIN, S. Dimension of spatially embedded networks. **Nature Physics**, v. 7, n. 6, p. 481-484, 2011.

PG178

Estudo de EPR do complexo dinuclear de cobre com ácido santônico

SILVA, Igor d'Anciães Almeida¹; GONZALEZ, Jose Pedro Donoso¹; ETCHEVERRY, Susana²; NASCIMENTO, Otaciro Rangel¹
idas.fisica@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata

Complexos de metais de transição com potencial farmacológico tem sido estudados nos últimos anos. O complexo dinuclear $[\text{Cu}_2(\text{sant})_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ (Cu(II)-ácido santônico) tem se mostrado promissor como agente anti-câncer e no combate a doenças ósseas, como a osteoporose.(1) Em sua forma cristalina, o complexo Cu(II)-ácido santônico apresenta estrutura cristalina tetragonal ($a = b = 14,498\text{\AA}$; $c = 64,07\text{\AA}$) sendo que cada íon Cu(II) esta ligado apenas com oxigênios (quatro no plano basal pertencentes a molécula do ácido santônico e um no eixo apical pertencente a uma molécula de água). A ponte que liga os dois íons de Cu(II) que formam a unidade dimérica é do tipo -O-C-O-.(1) O objetivo da presente pesquisa é estudar as interações de exchange e dipolar ente íons metálicos (no caso, o íon Cu(II)) transmitida pelas pontes moleculares que ligam estes íons. A técnica de Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR) tem se mostrado adequada para este tipo de estudo pois fornece a magnitude e a anisotropia da interação dipolar entre os íons Cu(II), que nos dão informações estruturais da amostra, como também o valor da constante de acoplamento de exchange, J , que nos permite caracterizar as ligações importantes nas reações de transferência de elétrons.(2) Os espectros de EPR da amostra cristalina em temperatura ambiente foram obtidos num espectrômetro Varian E-110 operando em banda Q (34,5GHz). Com o cristal orientado em uma base de KCl, foram obtidos os espectros de EPR da amostra nos três planos cristalinos (ab, ac e bc) variando-se o ângulo entre o campo magnético aplicado e os eixos cristalinos. Os espectros obtidos para os planos cristalinos ab, bc e ac exibem um comportamento típico do íon Cu(II) em simetria axial. (3) Para o plano ab, não se observou nenhuma variação angular apreciável dos sinais referentes as transições permitidas ($\delta M = \pm 1$). Nos espectros obtidos para os planos cristalinos bc e ac, é visível a presença de quatro linhas referentes as transições permitidas ($\delta M = \pm 1$). Dos resultados, é possível aferir a presença de duas unidades dinucleares magneticamente não-equivalentes.(3) Nestes planos, também é visível o sinal referente as transições proibidas ($\delta M = \pm 2$) quando o ângulo de aplicação do campo magnético está entre 0 e 90 graus e entre 0 e -90 graus. Os resultados de largura de linha e posição das linhas estão sendo analisados para a obtenção dos valores da constante de interação de exchange e da interação dipolar na amostra. Agradecimentos: Fapesp e CNPq

Palavras-chave: Ressonância paramagnética eletrônica. Unidades dinucleares. Acoplamento de exchange.

Referências:

1 WILLIAMS, P. A. M.; ZINCZUK, J.; BARRIO, D. A.; PIRO, O. E.; NASCIMENTO, O. R.; ETCHEVERRY, S. B. Potential antitumoral properties of a new copper complex with santonic acid. **Bioorganic & Medicinal Chemistry**, v.16, n. 8, p. 4313-4322, 2008.

2 CASADO, N. M. C.; ISAACSON, R. A.; CALVO, R. EPR study of eletronic properties and weak exchange interactions in bis(L-phenylalaninamidato)Cu(II). **Journal of Inorganic Biochemistry**, v. 84, n. 3-4, p. 201-206, 2001.

3 NAPOLITANO, L. M. B. **Estudos através da técnica de ressonância paramagnética eletrônica, em bandas X e Q, dos compostos dinucleares $\text{Cu}_2(\text{TzTs})_4$ e $[\text{Cu}(\text{flu})_2\text{DMF}]_2$** . 2009. 103 p. Tese (Doutorado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

PG179

Produção heteróloga dos complexos Sm envolvidos no processamento do pré-mRNA de *Trypanosoma brucei*

SILVA, Ivan Rosa e¹; SILVA, Marco Túlio Alves da¹; THIEMANN, Otavio Henrique¹

ivan.usp@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A família Trypanosomatidae é considerada de grande importância médica e econômica, uma vez que os parasitos protistas desta família são capazes de provocar doenças letais em seus hospedeiros. O grande impacto desses parasitos na saúde humana tem direcionado investigações dos processos moleculares peculiares desses organismos, como o processamento dos pré-mRNAs por *SL trans-splicing*, necessário para resolver os transcritos de RNA policistrônico em mRNAs maduros. (1) Por ser um mecanismo ausente em vertebrados, nos quais ocorre o *cis-splicing*, suas proteínas participantes podem ser consideradas importantes alvos parasito-específicos. (1-2) O spliceossomo é um complexo nuclear que interage com o SL RNA e o pré-mRNA para catalisar o *SL trans-splicing*, sendo composto por pequenas partículas ribonucleoproteicas nucleares (U1, U2, U4, U5 e U6 snRNPs), formadas por snRNAs e fatores proteicos específicos associados. Todos os U snRNAs, exceto o U6 snRNA, são exportados do núcleo ao citoplasma celular, onde se ligam a sete proteínas Sm (B, D1, D2, D3, E, F e G) que formam um anel hetero-heptamérico. (2) Diferentemente do core Sm descrito para *cis-splicing*, foram observadas variações nessas estruturas de *trans-splicing*, com as proteínas Sm16,5K e Sm15K substituindo as proteínas SmD3 e SmB no core Sm de U2 snRNPs e com a proteína Ssm4 substituindo a proteína SmD3 em U4 snRNP. (3) Para a produção dos complexos proteicos, as construções SmD3/B, SmE/F/G, SmD1/D2 e Sm16,5K/15K em vetor de expressão pEQ30 (Qiagen) foram coexpressas em *E. coli* SG13009 por indução com 0,5 mM de IPTG durante seis horas e o produto solúvel foi copurificado por meio de Cromatografia de Afinidade a íon níquel (HiTrap IMAC HP - Qiagen). Realizou-se, então, a montagem *in vitro* dos anéis heptaméricos, a qual foi confirmada por meio de Cromatografia de Exclusão Molecular Analítica em coluna SUPEROSE 12 10/300 (GE) e Eletroforese em Gel Nativo. Experimentos iniciais de rastreamento de condições de cristalização foram realizados com robô Honeybee 931 (Genomic Solutions Inc) para a avaliação de diferentes agentes precipitantes na cristalização dos complexos proteicos. Estudos estruturais serão realizados para investigação dos resíduos de aminoácidos determinantes na função dos cores Sm de *trans-splicing* em *T. brucei*.

Palavras-chave: *Trans-splicing*. Complexos Sm. *Trypanosoma brucei*.

Referências:

- 1 GUNZL, A. The pre-mRNA splicing machinery of Trypanosomes: complex or simplified? **Eukaryotic Cell**, v. 9, n. 8, p.1159-1170, 2010.
- 2 LASDA, E. L.; BLUMENTHAL, T. Trans-splicing. **Wiley Interdisciplinary Reviews - RNA**, v. 2, n. 3, p. 417-434, May/June 2011.
- 3 WANG, Z. et al. Sm core variation in spliceosomal small nuclear ribonucleoproteins from *Trypanosoma brucei*. **The EMBO Journal**, v. 25, n.2, p. 4513-4523, 2006.

PG180

Modelagem computacional da transmissão óptica via geração de plasmons em fendas subwavelength

SILVA, Otávio de Brito¹; FERRI, Fabio Aparecido¹; GARCIA RIVERA, Victor Anthony¹; OSÓRIO, Sérgio Paulo Amaral¹; BORGES, Ben-Hur Viana²; ZANATTA, Antônio Ricardo¹; WEINER, John¹; MAREGA JUNIOR, Euclides¹

otavio@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Departamento de Engenharia Elétrica - EESC - USP

Desde que foi observada há pouco mais de uma década (1), a transmissão óptica extraordinária (TOE) devido a um arranjo periódico de orifícios feitos sobre uma superfície metálica, ainda serve como referência para muitos estudos a respeito do comportamento da luz em estruturas cujas dimensões são menores do que seu comprimento de onda. Isso porque, a teoria da difração de Abbe estabelece um limite no qual é possível detectar o padrão de luz transmitida por determinado objeto que porventura sirva como obstáculo à passagem do feixe luminoso. Tal limite, conhecido como limite de difração depende do comprimento de onda da radiação que incide sobre a estrutura, e do índice de refração da mesma: $(\frac{\lambda}{2n})$. Bethe (2) obteve uma solução analítica para a transmissão em pequenos orifícios feitos em uma superfície de condutividade elétrica e dimensões infinitas. Porém, em situações reais isto não é possível. Na tentativa de compreender qual o motivo de se detectar a luz em tais estruturas, foi utilizado o argumento de que a geração de plasmons de superfície, acoplamento entre a radiação eletromagnética incidente com os elétrons livres presentes no metal na interface com um dielétrico, contribuiria na transmissão óptica. A partir deste conceito, inúmeras publicações foram realizadas. Em vista do avanço de técnicas de nanofabricação foi possível obter estruturas (também conhecidas na literatura como subwavelength) de maior complexidade para analisar os efeitos plasmônicos, entre outras propriedades ópticas. Porém, pela facilidade de se fabricar e por apresentar características similares a um arranjo periódico, escolhemos a fenda feita em filmes de ouro (Au) e prata (Ag) depositados em vidro BK7, como objeto de nosso estudo. Trabalhos recentes como (3) demonstram isso. Verificaremos, por meio de modelagem computacional, como tal estrutura possui comportamento similar à cavidade Fábry-Perot, quando variarmos a espessura do filme. Também faremos a comparação entre as propriedades da transmissão óptica para um arranjo de fendas e na presença de uma única fenda. Além disso, buscamos compreender qual a influência na transmissão quando consideramos fendas fabricadas em filmes com camadas alternadas de Au e Ag.

Palavras-chave: Transmissão óptica extraordinária. Nanoplasmônica. Ondas de superfície.

Referências:

1 EBBESEN, T. W.; LEZEC, H. J.; GHAEMI, H. F.; THIO, T.; WOLFF, P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. **Nature**, v. 391, p.667-669, 1998.DOI:10.1038/35570.

2 BETHE, H. A. Theory of diffraction by small holes. **Physical Review**, v. 66, n. 7/8, p.163-182,1944.

3 FERRI, F. A.; RIVERA, V. A. G.; OSÓRIO, S. P. A; SILVA, O. B.; ZANATTA, A. R.; BORGES, B-H. V.; WEINER, J.; MAREGA, E. Influence of film thickness on the optical transmission through subwavelength single slits in metallic thin films. **Applied Optics**, v. 50, n. 31, p.11-16, 2011.

PG181

Estrutura cristalográfica da região citoplasmática da proteína PelD, um precursor da biossíntese de polisacarídeo em *Pseudomonas aeruginosa*

SILVA, Sumária Sousa¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹

sumariasousa@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Altas concentrações de bis (3'-5') monofosfato de diguanosina cíclica (c-di-GMP), regula diversos fenótipos em bactérias, incluindo a formação de biofilme. (1) O patógeno oportunista *Pseudomonas aeruginosa* produz o polissacarídeo responsável pela formação de biofilme na interface ar-líquido de uma superfície. (2) Dentre as proteínas necessárias para a produção do exopolissacarídeo a proteína transmembrar PelD de 51 kDa, foi identificada como um precursor da biossíntese de polissacarídeo e também como um receptor específico de c-di-GMP. (3) Neste trabalho a região citoplasmática de PelD foi cristalizada na forma apo e complexada com o ligante em duas condições do kit Index (HAMPTON Research): F7 e G3. Os cristais foram submetidos à difração de raios-X, e teve sua estrutura resolvida pelo método de incorporação de metal pesado. Obtivemos um conjunto de dados a 1,9 Å de resolução, grupo espacial C2 com parâmetros de cela equivalentes $a = 110,6 \text{ Å}$, $b = 43,4 \text{ Å}$, $c = 79,7 \text{ Å}$, $\beta = 133,5^\circ$, com excelente estatística, Rmeas de 6,7 % (44,14%) e $I/\sigma(I)$ de 12,9 (2,5). A estrutura revelou a presença de dois domínios: GAF no N-terminal e o GGDEF degenerado no C-terminal. Este último apresentou resíduos conservados (RxxD) de ligação ao c-di-GMP, o qual normalmente atua no sítio inibitório de enzimas diguanilato ciclases. Usando a técnica de calorimetria de titulação isotérmica (ITC), demonstramos que PelD tem uma grande afinidade por c-di-GMP, apresentando $K_d = 6,53 \mu\text{M}$ e uma estequiometria de 1:1, corroborando com os dados de cristalografia. Informações estruturais a respeito do modo preciso de ligação de c-di-GMP a seus receptores representam uma parte crucial nos circuitos de sinalização bacteriana e, portanto, representam valiosos alvos para o desenvolvimento de novas terapias.

Palavras-chave: *Pseudomonas aeruginosa*. C-di-GMP. PelD.

Referências:

- 1 JENAL, U.; MALONE, J. Mechanisms of cyclic-di-GMP signaling in bacteria. **Annual Review of Genetics**, v. 40, p. 385-407, 2006.
- 2 FRANKLIN, M. J.; NIVENS, D. E.; WEADGE, J. T.; HOWELL, P. L. Biosynthesis of the *Pseudomonas aeruginosa* extracellular polysaccharides, alginate, Pel and Psl. **Frontiers in Microbiology**: cellular and infection microbiology, v. 2, n. 167, p. 1-16, 2011.
- 3 LEE, V. T.; MATEWISH, J. M.; KESSLER, J. L.; HYODO, M.; HAYAKAWA, Y.; LORY, S. A cyclic-di-GMP receptor required for bacterial exopolysaccharide production. **Molecular Microbiology**, v. 65, n.6, p. 1474-1484, 2007.

PG182

Interação spin-carga em ferromagnetos itinerantes unidimensionais

Spin-charge interaction in one-dimensional itinerant ferromagnets

SILVEIRA, Hudson Pimenta¹; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves¹

hudpsa@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Ferromagnetismo itinerante permanece um desafio em Física Teórica. Isto porque o fenômeno resulta de uma competição entre interação eletrônica e efeitos de muitos corpos, e não pode ser atacado perturbativamente. Em uma dimensão, em particular, sabe-se que sistemas são descritos, em certas condições, por líquidos de Luttinger (1), que desfavorecem ordem magnética. Além disso, um teorema devido a Lieb e a Mattis (2) proíbe ferromagnetismo para uma série de modelos. Há, entretanto, modelos na literatura (3) que violam as hipóteses do teorema e para os quais ferromagnetismo foi estabelecido em casos particulares de densidade eletrônica. Bosonizamos uma versão generalizada desses modelos em busca de instabilidade no setor de spin do modelo de Luttinger, indicada por uma mudança de sinal na velocidade dos spinons. Verificamos, entretanto, que, no regime fracamente interagente e de baixas energias, quando se aplica a técnica de bosonização tradicional, o setor de spin permanece estável. Já no setor de carga, em um caso particular de densidade eletrônica, há uma transição para um isolante de carga. É neste mesmo caso que fase ferromagnética foi estabelecida rigorosamente, o que leva à pergunta de se há conexão entre as fases. Para respondê-la, modificamos a densidade eletrônica e estudamos a estabilidade ferromagnética no regime fortemente interagente, acoplando os mágnons do modelo a férmions sem spin. Calculamos perturbativamente a autoenergia dos mágnons e encontramos singularidades, o que indica uma falha na teoria de perturbação. O significado físico dessas singularidades precisa ser melhor investigado.

Palavras-chave: Ferromagnetismo itinerante. Bosonização. Líquido de Luttinger.

Itinerant ferromagnetism remains a challenge in theoretical physics. The phenomenon arises from a competition between electronic interaction and many-body effects, and cannot be treated perturbatively. Particularly in one dimension, it is known that systems are described, in certain conditions, by Luttinger liquids (1), that disfavors magnetic order. Moreover, a theorem due to Lieb and Mattis (2) forbids ferromagnetism for a number of models. There are, however, models in the literature (3) that violate the hypothesis of the theorem and for which ferromagnetism has been established in particular cases of electronic density. We bosonized a more general version of these models, seeking for instability in the spin sector of the Luttinger model, indicated by a change of sign in the spinons velocity. We verified, however, that, in the weakly interacting regime and for low energies, when we can apply the traditional bosonization technique, the spin sector remains stable. In the charge sector, for a particular case of electronic density, there is a transition to a charge insulator. The transition occurs in the same case for which ferromagnetic phase has been rigorously established, leading us to question if there is a connection between these phases. To answer this, we modified the

electronic density and studied the ferromagnetic stability in the strongly interacting regime, by coupling the magnons of the model to spinless fermions. We calculated perturbatively the magnon self-energy and found singularities, which means a failure in perturbation theory. The physical meaning of these singularities must be better investigated.

Keywords: Itinerant ferromagnetism. Bosonization. Luttinger liquid.

Referências:

1 HALDANE, F. Luttinger liquid theory of one-dimensional quantum fluids. I. properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas. **Journal of Physics C: solid state physics**, v.14, n. 19, p. 2585, 1981. DOI:10.1088/0022-3719/14/19/010.

2 LIEB, E.; MATTIS, D. Theory of ferromagnetism and the ordering of electronic energy levels. **Physical Review**, v. 125, n. 1, p. 164-172, 1962.

3 TASAKI, H. Ferromagnetism in Hubbard models. **Physical Review Letters**, v. 75, n. 25, p. 4678-4681, 1995.

PG183

Informação sensorial e o controle motor do voo em *Chrysomya megacephala*

SILVERIO, Carolina Menezes¹; KOBERLE, Roland¹; PINTO, Reynaldo Daniel¹

carolina.silverio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O objetivo deste trabalho é analisar se o neurônio sensorial H1, presente no sistema visual da mosca, depende de alguma forma do comportamento de voo do inseto. O H1 se localiza na placa lobular do sistema visual e é sensível à movimentos horizontais. Muitos estudos têm explorado o código neural da mosca através do registro dos potenciais de ação desse neurônio enquanto o inseto observa uma imagem pré-definida. (1) No entanto esses experimentos são limitados pois em sua maioria utilizam os animais presos ou anestesiados, bem longe das condições naturais. Assim, consideramos interessante investigar se existe alguma mudança na resposta de um neurônio sensorial do sistema visual quando o animal não está apenas parado recebendo o estímulo, e sim, exibindo um comportamento de voo. Para isso, desenvolvemos um suporte que permite realizarmos medidas eletrofisiológicas do H1 em *Chrysomya megacephala* fixando apenas parte de seu corpo enquanto as asas batem livremente. A mosca observa à sua frente um padrão de barras verticais se movendo horizontalmente a uma taxa de 500 Hz. (2) Comparamos as respostas do neurônio quando o inseto está parado e quando está voando. Adicionalmente, obtivemos dados da atividade dos potenciais de ação dos músculos que controlam a direção do voo e do sinal do batimento das asas capturados por dois pequenos microfones posicionados a uma pequena distância de cada asa. Com esses dados pretendemos investigar a relação entre resposta motora e o estímulo visual. Nossa intenção é verificar se há um padrão claro na resposta motora que indique a direção de voo a fim de usá-lo para controlar a imagem em tempo real em projetos futuros (a própria mosca controlaria seu voo durante o experimento). (3). Até esse momento o trabalho possui resultados ainda inconclusivos e em fase de densas análises. Porém, resultados preliminares já nos fornecem uma boa perspectiva de que esse estudo virá responder uma questão até então pouco abordada além de contribuir para o aprimoramento dos experimentos com sistema visual da mosca que é tradicionalmente utilizado como paradigma do processamento de informação por um sistema nervoso.

Palavras-chave: Informação sensorial. Código neural. Controle motor.

Referências:

- 1 BORST, A.; HAAG, J. Neural networks in the cockpit of the fly. **Journal of Comparative Physiology A: neuroethology, sensory, neural and behavioral physiology**, v. 188, n. 6, p.419-437, 2002.
- 2 GAZZIRO, M. A . **Desenvolvimento e implementação de instrumentação eletrônica para criação de estímulos visuais para experimentos com o duto óptico da mosca** . 2009. 87 p. Tese. (Doutorado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009 .
- 3 PINTO, R. D.; ELSON, R. C.; SZUCS, A.; RABINOVICH, M. I.; SELVERSTON, A. I.; ABARBANEL, H. D. I. Extended dynamic clamp: controlling up to four neurons using a single desktop computer and interface. **Journal of Neuroscience Methods**, v. 108, n. 7, p. 39-48, 2001 .

PG184

Influência de modelos de interação hadrônica na medida de composição de raios cósmicos

SOARES, Hendrik Marques¹; SOUZA, Vitor de¹

hendrik.soares@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Em física de partículas, um raio cósmico ultra relativístico (UHECR), é um raio cósmico com energia cinética extrema, muito maior que a massa típica de repouso de um hádron. Esses raios cósmicos são significantes para o estudo da interações hadrônicas de altas energias, superiores ao LHC. Um UHECR, ao entrar na atmosfera terrestre, inicia uma chuva de partículas secundárias, produzida por interações do raio cósmico com o ar, chamada chuva atmosférica extenso (CAE). O estudo da massa de um UHECR é extremamente complexo, devido a flutuação natural na primeira interação e ao desconhecimento da seção de choque em altas energias de um CAE. Uma técnica para se determinar tais massas é a taxa de alongação(1), definida por dois parâmetros do CAE: A profundidade no qual este atinge o máximo de partículas ($X_{\max}$) e a energia do raio cósmico primário. Estes resultados são comparados a modelos computacionais que simulam um CAE, permitindo assim que seja possível realizar a interpretação da massa do UHECR. Cada modelo de CAE possui a sua própria extrapolação da seção de choque, o que pode levar à diversas interpretações de massa. Em altas energias, existe um modelo no qual ocorre saturação de gluons dentro de um núcleo(2). Se essa saturação ocorrer na superfície nuclear, a seção de choque próton-núcleo e núcleo-núcleo cresce mais rapidamente em função da energia incidente quando comparada ao modelo de Glauber, sendo que a mesma saturação poderia ser observada em UHECR. Portanto, propomos o estudo da seção de choque próton-núcleo e núcleo-núcleo no desenvolvimento de um CAE através de modificações do modelo de interação hadrônica de altas energias em simulação de CAE(3), como por exemplo, SIBYLL. Após a simulação desse novo modelo, será analisada a influência da seção de choque na taxa de alongação para a interpretação da massa da partícula primária do UHECR.

Palavras-chave: Raios cósmicos. Saturação de gluons. Seção de choque.

Referências:

1 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. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.091101.

2 PORTUGAL, L.; KODAMA, T. Gluon saturation effects at the nuclear surface: inelastic cross section of proton-nucleus in the ultra-high-energy cosmic ray domain. **Nuclear Physics A**, v. 837, p 1-14, 2010. DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2010.02.007.

3 HECK, D. et al. **CORSIKA**: a Monte Carlo code to simulate extensive air showers. Disponível em: <http://corsair.ff.bg.ac.rs/CORSIKA_PHYSICS.pdf>. Acesso em: 02 ago. 2012.

PG185

Descoerência e emaranhamento no efeito de magneto-recepção

SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico¹; PINTO, Diogo de Oliveira Soares¹

pmsoares02@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Fenômenos como coerência, descoerência e emaranhamento são frequentes em trabalhos relacionados à informação quântica. O maior obstáculo que os pesquisadores desta área enfrentam é: Como entender a interação do sistema de interesse com o ambiente? Em sistemas quânticos abertos tal interação é responsável pelo fenômeno de descoerência, isto é, estados inicialmente puros se tornam uma mistura estatística de estados possíveis, de forma que há uma perda de informação para o ambiente. (1) Por outro lado, o emaranhamento entre duas partículas é um fenômeno tipicamente quântico, que nos permite ter acesso à informação sobre o estado de uma das partículas apenas com o conhecimento prévio sobre o estado da outra, mesmo que estejam separadas espacialmente. (2) Trabalhos recentes na interface entre a física e a biologia fizeram surgir a seguinte pergunta: Seria a vida governada pelas leis da mecânica quântica? Surge então uma nova área de pesquisa denominada biologia quântica, e inúmeros pesquisadores já se dedicam a tentar responder tal pergunta, criando modelos quânticos para explicar fenômenos biológicos como a fotossíntese e a seleção natural. Nesse contexto, certos pássaros migratórios são capazes de perceber até mesmo pequenas variações do campo magnético terrestre, utilizando-o como orientação durante suas longas viagens. Tal fenômeno é conhecido como compasso das aves, ou magneto-recepção. Visando explicar resultados experimentais propõe-se o seguinte modelo: Um par de elétrons emaranhados é criado quando uma molécula presente no nervo ótico do pássaro é excitada por um fóton. Além disso, há interação hiperfina entre o núcleo da molécula e um dos elétrons emaranhados. Tal modelo é conhecido como radical pair, ou simplesmente modelo RP. (3) Especula-se que tal sistema físico seja capaz de explicar o mecanismo biológico de orientação das aves. O objetivo do trabalho é investigar a dinâmica do sistema utilizando uma equação mestra, e o papel do emaranhamento no modelo. Esperamos responder a essas e demais questões que porventura surgirem no decorrer do trabalho.

Palavras-chave: Informação quântica. Descoerência. Emaranhamento.

Referências:

- 1 BREUER, H-P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. Oxford: Oxford University Press, 2007.
- 2 VEDRAL, V. **Introduction to quantum information science**. Oxford: Oxford University Press, 2006.
- 3 VEDRAL, V. et al. Sustained quantum coherence and entanglement in the avian compass. **Physical Review Letters**, v. 106, 2011. DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.040503.

PG186**Interação de QD's com SPP's****Interaction of QD with SPP's**

SOBREIRA, Fernando Wellysson de Alencar¹; MAREGA JUNIOR, Euclides¹; SUKHAREV, Maxim²
fwellysson@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Arizona State University

Desde a observação experimental de uma transmissão óptica extraordinária por Ebbesen et al.(1) em estruturas abaixo do comprimento de onda da luz, está sob investigação o efeito da propagação de Plasmon Poláritons de Superfície (SPP - do inglês "Surface Plasmon Polaritons") sobre nanoestruturas metálicas. Um novo campo de pesquisa emergente lida com a interação destes SPP's com ensembles de nanomateriais(2) e nanopartículas metálicas (NP). Foi demonstrado tanto teoricamente(3) como experimentalmente que a utilização correta das propriedades ópticas destas nanoestruturas metálicas no regime abaixo da escala do comprimento de onda pode levar ao aprisionamento óptico de átomos/moléculas simples. No presente trabalho, estudaremos a interação de SPP's com um ensemble de pontos quânticos (QD - do inglês "quantum dot") posicionados sobre uma nanoestrutura metálica de Ag. Analisamos o efeito de um QD simples colocado sobre ou dentro de um orifício quadrado numa estrutura de Ag, bem como a interação de uma camada destes QD's sobre uma estrutura metálica de Ag consistindo de um arranjo de fendas simples infinitas. Isto é feito resolvendo-se as equações de Maxwell $\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{E}$, $\epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}$, com o método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo (FDTD - do inglês "Finite Difference Time Domain") para a propagação de luz através da estrutura, acopladas à equação de Liouville-von Neumann $i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}] - i\hbar \hat{\Gamma} \hat{\rho}$, que descreve a evolução da dinâmica quântica do sistema de QD's. Os QD's são considerados como sistema de quatro níveis, um tipo s como estado fundamental e três níveis degenerados do tipo p como estados excitados, e também é levado em consideração o tempo de vida não-radiativo dos estados excitados, descritos pelo operador fenomenológico $\hat{\Gamma}$. Utilizando este modelo autoconsistente vamos investigar as propriedades de transmissão destes sistemas.

Palavras-chave: FDTD. Plasmonica. Ponto quântico.

Since the experimental observation of extraordinary optical transmission by Ebbesen et. al.(1) in subwavelength structures, it has been under study the effect of the propagation of Surface Plasmon Polaritons (SPP) over metallic nanostructures. A newly emerging research field deals with the interaction of these SPP's with ensembles of nanomaterials(2) and metal nanoparticles (NP). It has been shown both theoretically(3) and experimentally that proper utilization of optical properties of such metal nanostructures at the subwavelength scale may lead to single atom/molecule optical trapping. In the present work we study the interaction of SPP's with an ensemble of quantum dots (QD) placed over a metallic Ag nanostructure. We analyse the effect of a single QD placed over or inside a square hole in a Ag structure as well as

the interaction of a layer of these QD's over a Ag structure consisting of an array of slits. This is done by solving Maxwell's equations $\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{E}$, $\varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}$, with the Finite Difference Time Domain (FDTD) method for the propagation of light through the structure, coupled to Liouville-von Neumann equation $i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}] - i\hbar \hat{\Gamma} \hat{\rho}$, that describes the quantum dynamics evolution of the QD's. The QD's are taken as four level systems with an *s*-type ground state and three degenerate *p*-type excited states, and it is also taken into account the radiationless lifetime of the excited states, described by the phenomenological $\hat{\Gamma}$ operator. Using this proposed self-consistent model we will scrutinize transmission properties of such systems.

Keywords: FDTD. Plasmonics. Quantum dot.

Referências:

- 1 EBBESEN, T. W.; LEZEC, H. J.; GHAEMI, H. F.; THIO, T. ; WOLF, P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. **Nature** v.391, p.667-669,1998.DOI:10.1038/35570.
- 2 SUKHAREV, M.; NITZAN, A. Numerical studies of the interaction of an atomic sample with the electromagnetic field in two dimensions. **Physical Review A**, v. 84, p.043802, 2011. DOI:10.1103/PhysRevA.84.043802.
- 3 CHANG, D. E.; THOMPSON, J. D.; PARK, H.; VULETIC, V. ; ZIBROV, A. S.; ZOLLER, P.; LUKIN, M. D. Trapping and manipulation of isolated atoms using nanoscale plasmonic structures. **Physical Review Letters**, v.103, n.12, p.123004,2009.

PG187**Modelo de circuito elétrico em capacitores EIS com bicamadas de PAMAM/SWNT**

SOUSA, Marcos Antonio Moura de¹; SIQUEIRA JUNIOR, José Roberto²; VERCİK, Andrés³; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de¹
marcos.moura.fis@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Exatas, Naturais e Educação - UFTM

³Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos - USP

Com o desenvolvimento de pesquisas na área de dispositivos de efeito de campo se tornou possível criar um novo mecanismo para monitorar atividades metabólicas diferente do sistema por monitoramento de correntes faradaicas. Dispositivos EIS (Eletrólito-Isolante-Semicondutor) são capacitores onde os eletrodos metálicos convencionais são substituídos por uma camada semicondutora e uma solução eletrolítica, onde podem ser adsorvidos nanomateriais, onde neste trabalho foram adsorvidos bicamadas de dendrímeros (PAMAM) e nanotubos de carbono (SWNT). Inicialmente foram determinados parâmetros intrínsecos dos chips semicondutores de silício como concentração de dopantes e potencial de banda plana, através do uso de métodos de cálculo usando as curvas de Capacitância versus Potencial. Medidas de Espectroscopia de Impedância feitas a cada acréscimo das bicamadas de PAMAM/SWNT são usadas para investigar de que maneira estas bicamadas influenciam no comportamento dos elementos do circuito equivalente de um capacitor EIS, como capacitância de dupla camada, elemento de fase constante e capacitância da região de depleção. A análise dos dados sugerem que o chip apresenta maior eficiência com a adsorção de três bicamadas, por apresentar menor resistência de transferência de íons.

Palavras-chave: EIS. PAMAM/SWNT. Dispositivos de efeito de campo.

Referências:

1 SZE, S. M. **Physics of semiconductor devices**. New York: Wiley-Interscience, 1994.

2 BARSOUKOV, E.; MACDONALD, J. R. **Impedance spectroscopy**. New York: Wiley-Interscience, 2005.

PG188

Fabricação e caracterização de células eletroquímicas emissora de luz

SOUSA, Washington da Silva¹; FARIA, Roberto Mendonça¹

wssousa@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As células eletroquímicas poliméricas emissoras de luz (PLEC)(1) têm despertado grande interesse tecnológico por apresentarem alta eficiência, baixa tensão de operação, baixa sensibilidade à espessura do dispositivo e função trabalho dos eletrodos. A liberdade na escolha dos eletrodos das PLECs facilita o processo de produção dos mesmos, podendo produzir dispositivos totalmente orgânicos e flexíveis. Neste dispositivo a presença de sais auxilia na injeção de portadores de cargas pelos eletrodos (2,3), mas os fenômenos físicos envolvidos na operação das PLECs não são totalmente compreendidos ainda. Para investigar os fenômenos de transporte nas PLECs nos construímos dispositivos na estrutura ITO/blenda/Al, sendo que a blenda foi formada com o Poli [(9, 9 - dioctil - 2, 7 - divinileno - fluorenileno) - alt - co -2 - metóxi -5 - (2 - etil-hexilóxi) - 1,4 - fenileno] (PFGE), Poli óxido de etileno (PEO) e triflato de lítio (TriLi). As curvas de corrente em função da tensão tendem para uma simetria. A tensão de operação dos dispositivos varia de 3,5 a 4,5 V e luminescência foi de centenas de cd/m². A Eletroluminescência apresenta um pico em 519 nm com um *ombro* em 538 nm e a largura do pico a meia altura é de 50nm.

Palavras-chave: Células eletroquímicas emissora de luz. Polímeros. Polieletrólito.

Referências:

- 1 PEI, Q.B.; YU, G.; ZHANG, C.; YANG, Y.; HEEGER, A.J. Polymer light emitting electrochemical cells. **Science**, v.269, n. 5227, p. 1086-1088, 1995.
- 2 DEMELLO, J.; TESSLER, N.; GRAHAM, S.C.; FRIEND, R.H. Ionic space charge effects in polymer light emitting diodes. **Physical Review B**, v.57, n. 20, p. 12951-12963, 1998.
- 3 SMITH, D.L. Steady state model for polymer light emitting electrochemical cells. **Journal of Applied Physics**, v. 81, n. 6, p.2869-2880, 1997.

PG189

Estrutura da enzima nucleosídeo difosfato quinase (NDPK) de *Schistosoma mansoni*

SOUZA, Juliana Roberta Torini de¹; ROMANELLO, Larissa¹; BRANDÃO NETO, José²; PEREIRA, Humberto D'Muniz¹
jutorini@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Diamond Light Source - Harwell Oxford - South Oxfordshire

Causada pelo parasita *Schistosoma mansoni*, a esquistossomose é uma doença crônica que afeta 230 milhões de pessoas no mundo sendo 6 milhões no Brasil. (1) O parasita *S. mansoni* não possui a via de síntese de bases púricas e depende integralmente da via de salvação. (2) A enzima NDPK faz parte desta via catalisando a transferência reversível do grupo γ -fosforil de um nucleosídeo trifosfato para um nucleosídeo difosfato. A importância da NDPK não está apenas na troca imprecisa de moléculas energéticas, ela também atua como uma histidina fosfotransferase atuando na endocitose e metastase. (3) A proteína, a partir do seu gene sintético, foi expressa, purificada e cristalizada no Oxford Protein Production Facility (OPPF) um centro de proteômica estrutural que realiza construções de vetores e expressão em larga escala, situado no Research Complex em Harwell-Inglaterra. Foram feitas quatro diferentes construções plasmidiais e todas foram testadas em *E. coli* B834 e Rosetta2. Também foram testadas duas condições de indução: 1mM IPTG 20°C *overnight* e expressão em meio auto indutor (ONEX) a 25°C por 20 horas. As condições que resultaram em melhor expressão foram: vetor POPINF, que fusiona a proteína alvo à uma cauda de histidina no N-terminal; expressão em células de *E. coli* Rosetta2 e indução com 1mM de IPTG 20°C *overnight*. A purificação foi feita primeiramente em coluna de níquel (Ni-NTA) e posteriormente em coluna de gel filtração (His-Gel Filtration S200) utilizando o equipamento Akta xpress. A purificação teve rendimento de 16 mg por litro de cultura. A proteína pura foi submetida ao *Pre-Crystallization test* (PCTTM) da empresa Hampton Research, onde foi determinado que a melhor concentração de proteína NDPK para cristalização é de 5mg/mL. A proteína foi submetida a ensaios de cristalização, onde foram testados quatro kits (Wizard 1 e 2, Index, Morpheus e JCSG+) com 96 diferentes condições de cristalização cada. Para a montagem das placas foram utilizados os equipamentos Hydra e Cartesian Microsys. As placas foram armazenadas no Formulatrix, um sistema de armazenamento e captação de imagem automatizado, que mantém as placas a 21°C. Os cristais da proteína NDPK começaram a crescer no intervalo de 12 horas. Foram obtidos cristais com a proteína na forma apo, em complexo com ADP, ATP e GDP. Os cristais foram submetidos à difração de raios X na linha I04-1 do Diamond Light Source em Harwell-Inglaterra. Foram coletados 5 conjuntos com a proteína na forma apo, 8 conjuntos com a proteína em complexo com ADP e 2 conjuntos com a proteína em complexo com ATP, ainda não foram obtidos conjuntos com a proteína em complexo com GDP. Até o momento foi processado um conjunto de dados (proteína na forma apo) a 1.7 Å de resolução. A NDPK cristalizou no sistema monoclinico com o grupo espacial C₂ com dimensões de cela a = 211,76 Å, b = 82,27 Å e c = 122,37 Å. O refinamento encontra-se com R_{work}(%) = 17,12 e R_{free}(%) = 21,04.

Palavras-chave: *Schistosoma mansoni*. NDPK. Estrutura cristalográfica.

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Schistosomiasis**. Fact sheet n. 115, 2012. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs115/en/index.html>>. Acesso em: 01 ago. 2012.
- 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.
- 3 MEHTA, A.; ORCHARD, S. Nucleoside diphosphate kinase (NDPK, NM23, AWD):recent regulatory advances in endocytosis, metastasis, psoriasis,insulin release,fetal erythroid lineage and heart failure;translational medicine. **Molecular and Cellular Biochemistry**, v. 329, n. 1-2, p. 3-15, 2009.

PG190

Planejamento e otimização de novos inibidores da enzima cruzaina de *Trypanosoma cruzi*

SOUZA, Mariana Laureano de¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

marianalaureano@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A doença de Chagas é um problema de saúde pública que atinge atualmente mais de 10 milhões de pessoas em todo o mundo.(1) O arsenal terapêutico contra a doença é limitado e insuficiente, tornando-se urgente o desenvolvimento de novos agentes antichagásicos. A enzima cruzaina, uma cisteíno-protease essencial para a sobrevivência do parasita *Trypanosoma cruzi*, foi o alvo molecular escolhido para estudos em química medicinal.(2) Os objetivos fundamentais deste projeto de doutorado são o planejamento e a otimização de novos inibidores da enzima cruzaina descobertos através de metodologias de triagem virtual de grandes bases de dados de compostos.(3) Atualmente, 19 estruturas da cruzaina em complexo com inibidores estão disponíveis no *Protein Data Bank* - PDB, fornecendo informações estruturais sobre essa enzima, permitindo assim, a aplicação de estratégias de planejamento de fármacos baseado na estrutura do receptor (SBDD, do inglês, *structure-based drug design*). Nesse trabalho, serão aplicados métodos de SBDD para a otimização de inibidores da cruzaina, com o objetivo de associar modelagem molecular, síntese orgânica e ensaios enzimáticos e biológicos na descoberta de um novo candidato a fármaco mais potente e seletivo para o tratamento da doença de Chagas.

Palavras-chave: Cruzaina. *Trypanosoma cruzi*. Química medicinal.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. WHO. Disponível em:<<http://www.who.int/tdr/diseases>>. Acesso em: ago. 2012.

2 CAZZULO, J.J. et al. . The major cysteine proteinase of *Trypanosoma cruzi*: a valid target for chemotherapy of Chagfas disease. **Current Pharmaceutical Design**, v. 7, n.12, p. 1143-1156, 2001.

3 DE 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 (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos,2012.

PG191

Investigação da dosimetria para TFD com o uso de fibra difusora: modelos in vitro e in vivo

STRINGASCI, Mirian Denise¹; FORTUNATO, Thereza Cury¹; MORIYAMA, Lilian Tan¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹
mirianstringasci@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A terapia fotodinâmica (TFD) tem sido utilizada no tratamento de lesões neoplásicas e a iluminação é um dos fatores essenciais para a indução da resposta adequada. No tratamento de tumores sólidos ou invasivos, recorre-se à TFD intersticial, em que fibras ópticas são inseridas no tumor. No entanto, as diferenças no perfil de emissão de luz a partir das fibras difusoras, dependendo do modo de fabricação, tamanho e propriedades, e dificultam o estabelecimento de uma dosimetria de luz apropriada. (1-3) Este trabalho tem por objetivo contribuir no entendimento de como a luz, emitida por uma fibra difusora, se comporta no meio turbido, assim como no tecido biológico. Dessa forma, pretende-se prever como a luz irá propagar no meio e, assim, poder estimar a dose exata de luz que deverá ser entregue ao tecido para que toda uma região seja irradiada. Para isto, foi utilizada uma fibra óptica com um difusor cilíndrico de 20 mm de comprimento emissor, acoplada a um laser de diodo em 630 nm e uma fibra óptica isotrópica de coleta para medir a intensidade de luz emitida pelo difusor em várias posições. As medidas permitiram obter uma caracterização do perfil de emissão da fibra, sendo o ar o único meio de propagação da luz nesse caso. Posteriormente, uma solução lipídica foi utilizada como phantom de tecido biológico e, com as fibras submersas na solução, foram realizadas medidas do campo de luz gerado por um elemento de 1 mm de comprimento do difusor cilíndrico de 20 mm. A partir da caracterização da emissão de um elemento, foi possível recuperar a distribuição de luz gerada por todo o difusor com melhores resultados quando considerada a caracterização prévia da fibra na ponderação da reconstrução. A TFD foi realizada em fígado de ratos sadios para a análise de uma resposta real e, com o auxílio de ferramentas computacionais, foi possível reconstruir a necrose constituída pela irradiação da fibra toda a partir da necrose gerada por um elemento difusor de 2 mm da fibra, com resultados otimizados novamente com o uso da caracterização da fibra para ponderar a soma. Os resultados demonstraram que através da caracterização do perfil de iluminação da fibra difusora e da distribuição de luz em meio turbido foi possível definir teoricamente um padrão de necrose semelhante ao observado no modelo animal.

Palavras-chave: TFD. Intersticial. Campos e luz.

Referências:

- 1 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.
- 2 LOWDELL, C. P.; ASH, D. V.; DRIVER, I.; BROWN, S. B. Interstitial photodynamic therapy: clinical experience with diffusing fibers in the treatment of cutaneous and subcutaneous tumors. **British Journal of Cancer**, v. 67, n. 6, p. 1398-1403, 1993.
- 3 STAR, W. M. Light dosimetry in vivo. **Physics in Medicine and Biology**, v. 42, n. 5, p. 763-787, 1997.

PG192

Mecanismos da geração de vórtices em superfluidos através de excitação oscilatória

Mechanism of vortices generation for a trapped superfluid under oscillatory excitation

TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti¹; TELLES, Gustavo Deczka¹; SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo¹; CASTELO BRANCO, Cora¹; BAGNATO, Guilherme de Guzzi¹; FARIAS, Kilvia Mayre¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

pedro.ernesto.tavares@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A nucleação de vórtices e a emergência de turbulência quântica induzidos por campos magnéticos oscilatórios, introduzidos nos trabalhos (1-2), deixaram algumas questões a respeito do mecanismo básico que causam estes interessantes fenômenos. Neste trabalho, apresentamos a observação experimental de um movimento contrapropagante em um condensado de Bose-Einstein (BEC) de átomos de ^{87}Rb sobre a influência de um campo magnético temporalmente oscilatório (3). Observamos a existência de um deslocamento relativo entre o centro de massa do condensado e da nuvem térmica. Esse movimento contrapropagante pode ser identificado como um modo de oscilação fora de fase entre essas componentes da nuvem atômica, o qual é o responsável por produzir ondulações na interface entre o condensado e a nuvem térmica, as quais estão relacionadas ao início da nucleação de vórtices. Esse movimento contrapropagante fornece evidências do mecanismo envolvido na nucleação e evolução de vórtices em superfluidos quando excitados por campos magnéticos dependentes do tempo.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Superfluididez. Excitações oscilatórias.

The vortex nucleation and the emergence of quantum turbulence induced by oscillating magnetic fields, recently introduced in the papers (1-2), left a few open questions concerning in the basic mechanisms that causes those interesting phenomena. In this work, we report the experimental observation of the slosh dynamics (counterflow) of a magnetically trapped Bose-Einstein condensate (BEC) of ^{87}Rb atoms under the influence of an external temporally oscillating magnetic field (3). We observed, under certain conditions, a clear relative displacement in between the condensed and the thermal fraction centers of mass. We have identified this relative counterflow movement as an out of phase oscillation mode, which is able to produce ripples (ondulation) on the superfluid (condensed) and thermal fractions interface. It was also seen that those ripples are more intense around the regions of larger relative motion speed. This out of phase mode provides good evidences of a mechanism involved in the vortex nucleation and evolution when the superfluid is excited by time dependent magnetic fields.

Keywords: Bose-Einstein condensate. Superfluidity. Oscillatory excitations.

Referências:

1 HENN, E. A. L. et al. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, p. 045301, 2009. DOI:10.1103/PhysRevLett.103.045301.

- 2 HENN, E. A. L. et al. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n.4, p. 043618, 2009. DOI:10.1103/PhysRevA.79.043618 .
- 3 TAVARES, P. E. S. **Consequências das excitações oscilatórias em condensados de Bose-Einstein**. 2012. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

PG193

Determinação da estrutura da proteína P21 de *Trypanosoma cruzi* por ressonância magnética nuclear de alta resolução

TEIXEIRA, Francesco Brugnera¹; MOREIRA, Helene Hellen Teixeira¹; HORJALES, Eduardo¹; MUNTE, Claudia Elisabeth¹
francesco.teixeira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As moléculas envolvidas na invasão de células de mamíferos por amastigotas extracelulares de *Trypanosoma cruzi*, o agente causador da Doença de Chagas, ainda são pouco conhecidas. Essas moléculas abrem a possibilidade de um subciclo alternativo de vida do *T. cruzi*, importante para a sobrevivência do parasita em condições de alta citotoxicidade propiciadas pelas células hospedeiras. A proteína P21 foi identificada como tendo alta probabilidade de ser secretada ou ancorada na membrana e está envolvida no processo de invasão celular por amastigotas extracelulares, porém ainda não podemos explicar como essa biomolécula atua no sistema de invasão a nível molecular. A determinação da estrutura tridimensional da P21 é, portanto, de fundamental importância para entender como a proteína se encaixa no complexo processo de invasão alternativo do *T. cruzi*. Quando expressa em *Escherichia coli*, mais de 95% da proteína se encontra insolúvel em corpos de inclusão, porém ainda apresenta atividade biológica quando extraída e reenovelada. Motivado por esse fato e pela grande variedade de técnicas disponíveis para fazer uma purificação em condições desnaturantes e posterior reenovelamento, desenvolvemos um protocolo para obtenção de grandes quantidades da P21 a partir dos corpos de inclusão. O correto reenovelamento foi confirmado por comparação dos espectros de ressonância magnética nuclear (RMN) 1D ¹H da proteína purificada da fração solúvel e da proteína reenovelada. A P21 marcada com ¹³C e ¹⁵N, necessária para os experimentos de RMN multidimensionais, foi expressa em *E. coli* crescida em meio mínimo contendo ¹³C-glicose e ¹⁵NH₄Cl como únicas fontes de carbono e nitrogênio. Espectros de tripla ressonância – HNCA, CBCA(CO)NH, HNCO e CBCANH – foram coletados em um espectrômetro Bruker de 600MHz, equipado com criosonda, no laboratório do Prof. Dr. Hans Robert Kalbitzer, Universität Regensburg, Alemanha. Sua análise se encontra em andamento e deverá fornecer o assinalamento sequencial da proteína, assim como a previsão de sua estrutura secundária. Experimentos futuros permitirão realizar o assinalamento completo da proteína, e a determinação de sua estrutura tridimensional.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Estrutura de proteínas. Doença de Chagas.

Referências:

1 SILVA, C. V. et al. Characterization of a 21 kDa protein from *Trypanosoma cruzi* associated with mammalian cell invasion. **Microbes and Infection**, v. 11, n. 5, p. 563-570, 2009.

PG194

Dinâmica de tempos curtos via hierarquia de equações de evolução do operador densidade do sistema

TEIZEN, Vítor Fernandes¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

victor.teizen@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A decoerência de estados quânticos é um problema central em mecânica quântica, especialmente em teoria da informação quântica onde se faz necessário o desenvolvimento de mecanismos de proteção de estados, tais como subespaços livres de decoerência, processos de desacoplamento dinâmicos, etc. Em 1996 apresentou-se uma técnica para a estimativa do tempo de decoerência baseada na expansão perturbativa do defeito de idempotência do operador densidade reduzido do sistema de interesse. (1) Uma vez que se trata do traço do operador densidade reduzido (2) do sistema, o tempo de decoerência derivado do defeito de idempotência independe, conforme esperado, da base escolhida para o tratamento do sistema. Neste trabalho, inspirados pelos resultados derivados da referência acima citada, devemos apresentar uma técnica que decorre - ao invés da expansão perturbativa do traço do operador densidade reduzido do sistema - da expansão perturbativa do próprio operador densidade reduzido. Quando inserimos a série perturbativa assim obtida na equação mestra que governa a evolução deste operador densidade, obtemos uma hierarquia de equações de evolução que oferece sucessivas correções à evolução do operador densidade reduzido e, conseqüentemente, ao defeito de idempotência. Devemos comparar esta técnica com aquela derivada na referência acima mencionada, analisando seus pontos positivos e negativos, além de aplicá-la a um conjunto de situações físicas distintas.

Palavras-chave: Decoerência. Operador densidade. Equação mestra.

Referências:

1 KIM, J. I.; NEMES, M. C.; PIZA, A. F. R. T.; BORGES, H. E. Perturbative expansion for coherence loss. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 2, p. 207-210, 1996.

2 WALLS, D. F.; MILBURN, G. J. **Quantum optics**. 2nd ed. Berlin: Springer, 2008.

PG195

Dinâmica de expansão de um CBE 2D: teste de vários Ansätze

TELES, Rafael Polisel¹; SANTOS, Francisco Ednilson Alves dos¹; CARACANHAS, Mônica Andrioli¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
rafael.fisica.unesp@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Partimos da idéia que a dinâmica de expansão livre de um condensado de Bose-Einstein é sua característica mais importante, assim, testamos vários Ansätze baseados no regime de Thomas-Fermi (TF) e um Ansatz Gaussiano. Usando calculo variacional (1-2) para avaliar a dinâmica dos parâmetros da função de onda numa aproximação 2D. Sendo esta aproximação é válida no limite de um condensado 3D de formato alongado, de maneira que a expansão da direção axial possa ser negligenciada. Portanto, dentro deste limite obtemos uma boa aproximação para a expansão do raio do vórtice, resultado o qual foi comparado com o caso 3D. Como resultado deste trabalho temos que a função de onda Gaussiana é um dos melhores Ansätze pois sua dinâmica é a que mais se aproxima da dinâmica no regime de Thomas-Fermi. Sendo a melhor aproximação quando os cálculos são complicados, uma vez que esta função de onda representa o limite do gás ideal.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Vórtice. Método variacional.

Referências:

- 1 PÉREZ-GARCÍA, V. M. et al. Dynamics of Bose-Einstein condensates: variational solution of the Gross-Pitaevskii equation. **Physical Review A**, v. 56, n. 2, p. 1424-1432, 1997.
- 2 LUNDH, E.; PETHICK, C. J.; SMITH, H. Vortices in Bose-Einstein-condensad atomic clouds. **Physical Review A**, v. 58, n. 6, p. 4816-4823, 1998.

PG196

Estudos estruturais e funcionais de expansinas, proteínas semelhantes à expansinas e swoleninas

TOMAZINI JÚNIOR, Atílio¹; POLIKARPOV, Igor¹

atilio.tomazini@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O desenvolvimento de uma matriz energética de base sustentável possui uma importância estratégica para qualquer nação industrializada ou em busca disso.(1) Dessa maneira, embora o etanol a partir da cana de açúcar (etanol de primeira geração) seja um setor muito bem desenvolvido no Brasil a busca de novas fontes de energia renovável como a utilização da biomassa lignocelulósica para produção de etanol (etanol de segunda geração) é de extrema importância. Neste contexto, expansina, proteína semelhante a expansina e swolenina são proteínas auxiliares extremamente promissoras para conversão e depolimerização de biomassa. Uma vez que, a ação cooperativa entre swoleninas/expansinas com outras proteínas possam servir para aumentar a eficiência da atividade catalítica de celulasas a família de proteínas objeto de estudo do presente trabalho desperta grande interesse para a hidrólise de biomassa. Portanto, estudos do ponto de vista molecular e estrutural desta família de proteínas abrem perspectivas para o entendimento do mecanismo de ação das mesmas e também sua aplicação na cadeia produtiva do etanol de segunda geração.

Palavras-chave: Expansinas. Swoleninas. Lignocelulose.

Referências:

1 HARRIS, P. V. et al. Stimulation of lignocellulosic biomass hydrolysis by proteins of glycoside hydrolase family 61: structure and function of a large, enigmatic family. **Biochemistry**, v. 49, n. 15, p. 3305-3316, 2010.

PG197

Fabricação de microestruturas poliméricas dopadas com nanopartículas de ouro

TRIBUZI, Vinicius¹; CORREA, Daniel Souza²; MENDONÇA, Cleber Renato¹

tribuzi@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²EMBRAPA

A polimerização via absorção de dois fótons (A2F) destaca-se no cenário atual como uma nova e promissora técnica para a fabricação de dispositivos poliméricos. O processo de polimerização apenas ocorrerá em regiões de alta intensidade, por isso usamos um feixe laser com pulsos de duração de femtossegundos focalizado na amostra através de uma objetiva de microscópio. Assim a polimerização fica confinada a um pequeno volume em torno do volume focal, permitindo a produção de microestruturas tridimensionais complexas, o que não é possível em outras técnicas mais convencionais.(1) Além disso, materiais poliméricos abrem a possibilidade de incorporar à sua matriz outros compostos, orgânicos e/ou inorgânicos, que possuam propriedades interessantes para aplicações em dispositivos fotônicos. Nesse contexto, nós reportamos a fabricação de microestruturas poliméricas dopadas com nanopartículas de ouro. Para tanto usamos um método de dopagem indireta que consiste em misturar à resina ainda líquida uma solução aquosa de HAuCl₄. Após o processo de polimerização a amostra é imersa em etanol, para remoção de toda a resina não polimerizada, deixando no substrato apenas as microestruturas que serão aquecidas. O processo de aquecimento fornece energia para a redução dos íons de ouro e também aumenta a mobilidade dos átomos de ouro na matriz polimérica, favorecendo a formação de nanopartículas. Esse processo é simples e permite a produção simultânea de diversas amostras. As nanopartículas de ouro possuem ampla gama de aplicações.(2) Por se tratar de um material biocompatível, são usadas como agentes de contraste em microscopia de fluorescência, inclusive em amostras biológicas. O engrandecimento do campo local devido à ressonância de plasmon também pode ser explorado em nossas microestruturas, com o intuito de produzir micro sensores.

Palavras-chave: Microestruturas. Absorção de dois fótons. Nanopartículas.

Referências:

1 SUN, H. B.; MATSUO, S.; MISAWA, H. Three-dimensional photonic crystal structures achieved with two-photon-absorption photopolymerization of resin. **Applied Physics Letters**, v. 74, n.6, p.786-788,1999.

2 JAIN, P. K.; HUANG, X.; EL-SAYED, I. H.; EL-SAYED, M. A. Review of some interesting surface plasmon resonance-enhanced properties of noble metal nanoparticles and their applications to biosystems. **Plasmonics**, v. 2, n.3, p.107-118, 2007. DOI: 10.1007/s11468-007-9031-1.

PG198

Fotofísica de polieletrólitos automontados na superfície de nanopartículas de poliestireno

TSUTAE, Fernando Massayuki¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹

f.tsutae@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Atualmente, é de grande interesse o estudo da interação entre sistemas moleculares e nanopartículas (NPs), principalmente nas áreas de células de combustíveis (1), dispositivos fotovoltaicos (2) e sistemas carregadores de drogas contendo especificidade celular para o tratamento de doenças. (3) Entretanto, os processos ópticos e as alterações moleculares produzidas pelas interações entre superfície e solvente nesse sistema ainda são pouco entendidos. Processos como transferência de carga e taxas de geração de oxigênio singlete podem ser fortemente alterados por interações deste tipo. Neste trabalho, pretendemos estudar a formação de multicamadas de polieletrólitos aniônicos e catiônicos (PHTT e DBS) automontadas alternadamente sobre a superfície de NPs de poliestireno, assim como as propriedades ópticas decorrentes da interação entre as monocamadas intermediárias. Utilizamos microscopia confocal e espectroscopia de fluorescência (PL) e de tempo de vida (FLIM) para fazer a caracterização óptica do sistema NP-polieletrólitos. Através dos recursos de microscopia disponíveis em nosso laboratório, torna-se também possível realizar estudos de transferência de energia (FRET) e de difusão molecular (FCS), o que pode fornecer importantes informações sobre as interações e estruturas moleculares do sistema.

Palavras-chave: Sistemas automontados. Microscopia confocal . FLIM.

Referências:

- 1 PARK, J.; YI, J.; TACHIKAWA, T.; MAJIMA, T.; CHOI, W. Guanidinium-enhanced production of hydrogen on nafion-coated dye-TiO₂ under visible light. **Journal of Physical Chemistry Letters**, v. 1, n. 9, p.1351-1355, 2010.
- 2 HAINS, A. W.; LIANG, Z.; WOODHOUSE, M. A.; GREGG, B.A. Molecular semiconductors in organic photovoltaic cells. **Chemical Reviews**, v. 110, n. 11, p. 6689-6735, 2010.
- 3 SOPPIMATH, K. S.; AMINABHAVI, T. M.; KULKARNI, A. R.; RUDZINSKI, W. E. Biodegradable polymeric nanoparticles as drug delivery devices. **Journal of Controlled Release**, v. 70, n. 1, p.1-20, 2001.

PG199

Redes complexas aplicadas a estudos da linguagem

VALENCIA, Camilo Akimushkin¹; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de¹

camilo.akimushkin@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A evolução e a estrutura das linguagens e textos literários satisfazem os requisitos necessários para a emergência de fenômenos complexos: elas partem de elementos interagindo de forma simples que não obstante acabam criando uma riqueza evidente. Por um lado, várias estruturas lingüísticas podem ser modeladas usando redes, tais como relações semânticas entre palavras ou relações sintáticas entre palavras para formar uma oração. Interessantemente, observou-se que tais redes apresentam características não triviais as quais inclusive estariam relacionadas com conceitos mais abstratos como clareza, legibilidade ou relevância do texto. (1) Em particular, evidenciam-se características próprias de sistemas complexos como são as distribuições livres de escala numa grande diversidade de redes. Neste projeto, além de caracterizar tais estruturas, tentaremos entender como elas foram desenvolvidas em primeira instância. É neste ponto que os avanços no estudo da evolução das linguagens podem ter uma importante contribuição. Alguns estudos tratam as linguagens como produto da interação de diversos sistemas complexos adaptativos em diversas escalas, os quais teriam definido características lingüísticas como a gramática ou a fonologia.(2) Este processo desenvolvido ao longo da história da humanidade poderia ter relação com o processo de aprendizagem de uma língua percorrido por um único indivíduo, o qual já mostrou ser capaz de reproduzir as redes semânticas observadas (3), o que é uma motivação do presente trabalho. O entendimento adquirido através desta abordagem poderia ter importantes aplicações práticas, como a melhora dos algoritmos de ferramentas de auxílio à escrita, onde seria possível desenvolver uma estrutura formal abstrata da linguagem levando em conta o processo por que passaram as línguas faladas. Este é outro aspecto da pesquisa a desenvolver neste projeto, em particular usando a UNL (Universal Networking Language), um projeto de tradução universal que não depende de nenhuma língua em particular.

Palavras-chave: Redes complexas. Lingüística computacional. Complexidade.

Referências:

1 ANTIQUEIRA, L.; NUNES, M. G. V.; OLIVEIRA, O. N.; COSTA, L. DA F. Strong correlations between text quality and complex networks features. **Physica A**, v. 373, p.811-820, 2007. DOI:10.1016/j.physa.2006.06.002.

2 SMITH, K.; BRIGHTON, H.; KIRBY, S. Complex systems in language evolution: the cultural emergence of compositional structure. **Advances in Complex Systems**, v. 6, n.4, p.537-558, 2004.

3 STEYVERS, M.; TENENBAUM, J. B. The large-scale structure of semantic networks: statistical analyses and a model for semantic growth. **Cognitive Science**, v.29, n.1, p.41-78, 2005.

PG200

Análise e caracterização de nanoestruturas de polímeros mediante imagens AFM

VALENCIA, Carolina Elisa Guillen¹; SILVA, Marcelo Pereira da¹; FARIA, Roberto Mendonça¹; BRUNO, Odemir Martinez¹
krolgv@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Os blocos de copolímeros, por sua formação de padrões na escala nanométrica, são necessários em muitas aplicações como na indústria de microeletrônicos, técnicas de revestimentos, técnicas de filtros, adesivos, lubrificação, biossensores, modelos submicrométricos, etc. Sendo assim, a automontagem nanométrica um dos maiores desafios em nanoengenharia química e de materiais, a criação de nanoestruturas de uma forma completamente espontânea e auto-organizada.(1) Em alguns experimentos particulares dos filmes finos de blocos de copolímeros sobre o substrato de mica mediante as técnicas de spin-coating, dip-coating ou auto ensablado formam-se estruturas finais de padrões de tiras e gotículas. Este é o caso do experimento a descrever, obtido por um processo de livre evaporação e desmolhamento do solvente, reportados na literatura.(2-3) Observando-se também a formação de tiras e gotículas. Neste reporte são analisadas e quantificadas as estruturas das gotículas, junto com os câmbios da fase das imagens, usando a técnica de TM-AFM. A ferramenta desenvolvida faz uma análise quantitativa de regiões de interesse numa imagem, observando-se com frequência certos fenômenos nos quais se deseja fazer as medições para a descrição destas observações. Esses dados podem ser utilizados posteriormente para a interpretação e análise de resultados, para logo ter as generalizações e conclusões.

Palavras-chave: Polímeros SEBS. Processamento imagens. TM-AFM.

Referências:

- 1 HAN, X.; HU, J.; LIU, H.; HU, Y. SEBS aggregate patterning at a surface studied by atomic force microscopy. **Langmuir**, v. 22, n. 7, p. 3428-3433, 2006.
- 2 KARTHAUS, O.; GRASJO, L.; MARUYAMA, N.; SHIMOMURA, M. Formation of ordered mesoscopic polymer arrays by dewetting. **Chaos**, v. 9, n. 2, p. 308-314, June 1999.
- 3 CARVALHO, A. J. F.; PEREIRA-DA-SILVA, M. A.; FARIA, R. M. Self-organization of triblock copolymer patterns obtained by drying and dewetting. **The European Physical Journal. E**, v. 20, n. 3, p. 309-15, July 2006.

PG201

Emaranhamento e discórdia quântica na superradiância

VEIGA, Rodrigo Soares¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

rodsveiga@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Pretendemos neste trabalho analisar a evolução do emaranhamento (1) e da discórdia quântica (2) em amostras atômicas superradiantes (3) submetidas a colisões controladas. Medidas de emaranhamento são utilizadas como testemunhas do fenômeno da transição de fase desde o início da década de 2000, estabelecendo uma importante conexão entre conceitos da teoria da informação quântica, da física da matéria condensada e da mecânica estatística. Mais recentemente, a discórdia, uma medida de correlações quânticas na ausência de emaranhamento, tem sido também utilizada como testemunha de transições de fase. Trabalhos pioneiros voltaram-se à investigação de propriedades do emaranhamento em transições de fase superradiantes. Pretendemos ampliar estas análises incorporando a interação dipolo-dipolo entre os átomos da amostra superradiante, via colisões controladas, concomitantemente ao estudo da evolução da discórdia neste sistema. Adicionalmente, devemos estender a análise do emaranhamento e da discórdia à teoria do laser, considerando, em analogia com a superradiância, uma amostra atômica como meio ativo do laser.

Palavras-chave: Emaranhamento. Discórdia quântica. Superradiância.

Referências:

1 WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 10, p. 2245-2248, 1998.

2 OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. **Physical Review Letters**, v. 88, n. 1, p. 17901-1-17901-4, 2002.

3 GROSS, M; HAROCHE, S. Superradiance: an essay on the theory of collective spontaneous emission. **Physics Reports**, v. 93, n. 5, p. 301-396, 1982.

PG202

Análise da relação estrutura e função em isoenzimas e em uma proteína putativa de *Streptomyces clavuligerus* envolvidas na biossíntese de ácido clavulânico.

VIEIRA, Débora Fernanda¹; GOTO, Leandro Seiji²; CHELESKI, Juliana¹; ARAUJO, Ana Paula Ulian de¹
deborafv@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Ácido clavulânico (AC) é um potente inibidor de beta lactamases produzido por *Streptomyces clavuligerus*. Os passos iniciais da sua biossíntese são conhecidos (1) sendo a primeira reação catalisada pela enzima carboxietil arginina sintase (CEAS) envolvida na condensação de gliceraldeído trifosfato (DG3P) com arginina para formar o produto carboxietil arginina. Já o terceiro passo da biossíntese de AC (2) envolve a enzima proclavaminato amidino hidrolase (PAH), também essencial na produção do AC. Os últimos passos desta via ainda não estão bem estabelecidos e se sugere a presença de algumas enzimas putativas que já tiveram suas *orfs* identificadas (3). Uma delas, a *orf12*, apresenta características de uma beta lactamase, porém nenhum estudo confirma sua atividade. Recentemente estudos revelaram cópias dos genes *ceas* e *pah* (esses genes foram denominados *ceas1* e *pah1*) e foram relacionados com a biossíntese de AC em *S.clavuligerus*, porém ainda não há relato de estudos com seus produtos protéicos. Aqui apresentamos a produção das proteínas recombinantes CEAS1 e PAH1 e do produto gênico da *orf12* e os primeiros estudos estruturais e de atividade dessas proteínas. Os respectivos genes e *orf* foram isolados a partir do DNA genômico de *S. clavuligerus* e clonados em vetores de expressão. As proteínas recombinantes foram purificadas por cromatografia de afinidade. Diferentes estados oligoméricos foram analisados por cromatografia de exclusão molecular e eletroforese em condições nativas, mostrando que PAH1 e ORF12 se apresentam como hexâmero e dímero, respectivamente, enquanto CEAS1 apresenta-se como uma mistura de oligômeros. Por análise de Dicroísmo Circular (CD), as proteínas CEAS1 e PAH1 mostraram um enovelamento do tipo alfa,beta sendo estáveis até 35°C e numa ampla faixa de pH (5,5 a 9,5). No estudo da atividade de ORF12, cefalosporina C e *p* nitrofenil acetato foram testados como substratos. A reação foi analisada por leitura da absorbância em espectrofotômetro em 616nm e 405nm, respectivamente, mostrando que ORF12 possui atividade de esterase. A técnica de Calorimetria de Titulação Isotérmica (ITC) foi utilizada para o estudo da atividade de PAH1 e CEAS1 mostrando que PAH1 é inativa sobre o substrato análogo *N* acetil arginina e CEAS1 apresenta atividade sob o substrato DG3P. Além disso, por ITC obtivemos os parâmetros termodinâmicos da ligação entre o cofator magnésio e CEAS1, mostrando que o processo é entropicamente dirigido, com estequiometria de ligação de 4:1, com constante de afinidade na ordem de micromolar. Para analisar as estruturas terciárias e quaternárias,CEAS1 e PAH1 foram submetidas à modelagem por homologia usando suas sequências primárias na ferramenta *Swiss Model server* , o que resultou na construção de modelos com 68 % de identidade para CEAS1 e 72 % para PAH1. Ademais, os resíduos de aminoácidos envolvidos na ligação dos cofatores e nos sítios ativos dessas proteínas estão conservados entre o molde e o modelo. As análises indicam, portanto que as isozimas 1 e 2 mantêm uma estrutura conservada, porém seus mecanismos de ação podem ser ligeiramente

diferentes para cada isoforma. Já a proteína putativa codificada pela *orf12* possui atividade esterase e atua sobre a cefalosporina C. apoio:FAPESP

Palavras-chave: *Streptomyces clavuligerus*. Isozimas. Estrutura.

Referências:

- 1 KHALEELI, N.; LI, R.; TOWNSEND, C. A . Origin of the beta Lactam carbons in clavulanic acid from an unusual thiamine pyrophosphate mediated reaction. **Journal of the American Chemical Society**, v. 121, n. 39, p. 9223-9224, 1999.
- 2 ELSON ,S. W. et al . The identification of three new biosynthetic intermediates and one further biosynthetic enzyme in the clavulanic acid pathway. **Journal of Chemical Society, Chemical Communications**, n.15, p. 1212-1214, 1993. DOI: 10.1039/C39930001212.
- 3 LI, R.; KHALEELI, N; TOWNSEND, C. A . Expansion of the clavulanic acid gene cluster: identification and in vivo functional analysis of three new genes required for biosynthesis of clavulanic acid by *streptomyces clavuligerus*. **Journal of Bacteriology**, v. 182, n. 14, p. 4087-4095, 2000.

PG203

Computação evolutiva aplicada à criatividade artística

VIEIRA, Vilson¹; FABBRI, Renato¹; TRAVIESO, Gonzalo¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

vilson@void.cc

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A criatividade é área de crescente interesse. (1) Sua simulação por computador permite tanto compreender melhor a própria criatividade humana quanto produzir novos materiais. Este trabalho se insere neste contexto, buscando formas de quantificar o desenvolvimento criativo – em especial nas artes – assim como a pesquisa de algoritmos capazes de gerar material sonoro ou visual originais. Um Algoritmo Genético (AG) interativo está sendo desenvolvido, que diferente do AG canônico, permite a um crítico (2) avaliar o material gerado – interferindo em seu cálculo de *fitness*. O mérito do material pode então ser analisado, buscando quantificar critérios estéticos segundo a preferência pessoal do crítico. Esta avaliação é um dos principais problemas dentro do que se conhece por Criatividade Computacional, justificando-se portando seu estudo. Um sistema que implemente tal algoritmo generativo tem aplicações interessantes nas artes. Por exemplo, um músico poderia utilizá-lo como fonte de material musical enquanto envolvido na composição de uma nova obra ou de uma apresentação de *live coding*. (3) Detalhes sobre o algoritmo e sua implementação são discutidos, assim como os resultados já obtidos.

Palavras-chave: Criatividade. Algoritmo genético. Música.

Referências:

- 1 FORTH, J.; WIGGINS G. A.; MCLEAN, A. **Unifying conceptual spaces**: concept formation in musical creative systems. Berlin: Springer, 2010. p. 503-532.
- 2 MACHADO, Penousal; ROMERO, Juan. On evolutionary computer-generated art. **Evolutionary Review**: art, science, culture. v.2, n.1, p. 156-170, 2011.
- 3 MCLEAN, A.; WIGGINS, G. A. **Live coding towards computational creativity**. London: University of London, 2010. Disponível em: <<http://doc.gold.ac.uk/ma503am/>>. Acesso em: 20 ago. 2012.

PG204

Sistema experimental para a produção de moléculas fotônicas de sódio numa armadilha magneto óptica

VIVANCO, Franklin Adán Julca¹; PAIVA, Rafael Rothganger de¹; PEDROZO-PEÑAFIEL, Edwin¹; FARIAS, Kilvia Mayre¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

franklinze@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Embora a interação entre dois átomos pode parecer ser simples, um estudo mais detalhado mostra que há uma vasta física por trás. Muitas observações de interesse foram feitas com ajuda das técnicas de resfriamento laser desenvolvidas no passado (1), que agora permitem atingir temperaturas de ao redor de 1 μ K acima do zero absoluto. Neste regime, o comprimento de onda de de Broglie das partículas excede por muito as distâncias de interação e a possibilidade de formação de uma molécula diatômica é totalmente regida pela mecânica quântica. Atualmente, a formação de gases atômicos frios numa Armadilha Magneto Óptica (AMO), tornou-se uma técnica muito conhecida, mas a criação de amostras moleculares frias estáveis em grandes números é um problema ainda a ser resolvido. A aplicação direta das técnicas de resfriamento laser em moléculas é geralmente inviável devido à densa estrutura de níveis destas. Neste trabalho estudamos as condições nas quais podem se criar estas moléculas numa AMO de sódio, por meio de foto-associação com campos laser. (2) Chamamos este tipo de moléculas como "Moléculas Fotônicas", porque esta formada pela absorção de dois fótons. Assim, um par de átomos de sódio livres em seu estado fundamental $3s_{1/2}$ é excitado por dois campos laser deslocados adequadamente da frequência do laser de aprisionamento dos átomos na AMO, produzindo a formação de um potencial atrativo que permite a formação de estados ligados moleculares. Um detalhe importante a ser levado em conta é que para maximizar a probabilidade de formação destas moléculas devemos ter o maior número possível de átomos no estado fundamental hiperfino $F = 1$. A fim de maximizar a taxa de foto-associação dos átomos, um "Dark Spot" (3) foi colocado para aumentar a densidade de da AMO. O "Dark Spot" colocado no centro do feixe de re-bombeio faz uma sombra no centro da AMO, permitindo um fluxo elevado de átomos a ser capturados sem perturbar esta e evitando que estes passem a um estado de maior energia. A fim de determinar o número de átomos aprisionados e a densidade da AMO, medimos estas a partir da fluorescência dos átomos, e usando um feixe de absorção com uma dessintonia de uns 5 MHz na frequência com respeito ao feixe de re-bombeio, respectivamente. Sobre condições otimizadas, temos carregado perto de 5×10^9 átomos com uma densidade na AMO aproximada de 5×10^{11} átomos/cm³. É com esta amostra que se tentará produzir a molécula fotônica no futuro.

Palavras-chave: Óptica atômica. Colisões frias. Processos multi-fotônicos .

Referências:

1 WEINER, J.; BAGNATO, V. S.; ZILIO, S.; JULIENNE, P. S. Experiments and theory in cold and ultracold collisions. **Reviews of Modern Physics**, v. 71, n. 1, p.1-85, 1999.

2 KREMS, R.; FRIEDRICH, B.; STWALLEY, W. C. **Cold molecules**: theory, experiment, application . Boca Raton: CRC Press, 2009.

3 MIRANDA, S. G.; MUNIZ, S. R.; TELLES, G. D.; MARCASSA, L. G.; HELMERSON, K.; BAGNATO, V. S. Dark-spot atomic-beam slowing for on-axis loading of traps. **Physical Review A**, v. 59, n. 1, p.882-885, 1999.

PG205

Construção de um sistema de imagem de fluorescência usando filtro óptico variável de cristal líquido para detecção de doenças em citros

WETTERICH, Caio Bruno¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹

caiovtrich@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O Laboratório de Interações Atômicas da USP de São Carlos e o Fundecitrus têm desenvolvido em conjunto um projeto de aplicação de tecnologia fotônica para detecção de doenças em citros. Nesta primeira etapa do projeto de doutorado, projetamos e construímos um novo sistema de imagem de fluorescência utilizando leds de alta potência, um filtro óptico de cristal líquido variável, filtros específicos para os leds e polarizadores. O filtro variável nos permitirá varrer continuamente o espectro de emissão da fluorescência entre 400 e 750 nm em intervalos de 10 nm, procurando por bandas de fluorescência de cada doença específica, não nos limitando mais a alguns filtros ópticos como no antigo sistema de imagem de fluorescência. Além disso, estudaremos imagens de fluorescência polarizadas. (1) É sabido que as folhas de citros contaminados com Greening acumulam amido. Inclusive tal acúmulo foi observado por Ehzani e colaboradores com espectroscopia na região do infravermelho. (2) Desta forma pretendemos obter imagens de fluorescência para cada doença em função do ângulo entre a polarização da luz de excitação e da fluorescência emitida. Resultados preliminares em relação à polarização da fluorescência na análise de amostras sadias e contaminadas com Greening nos mostram a possibilidade de discriminação da doença através da variação no ângulo de polarização. Alguns experimentos estão sendo conduzidos a fim de verificar tais resultados, de tal maneira que observamos uma polarização intrínseca no conjunto filtro óptico e CCD, necessitando ser resolvido a fim de melhorar nossos resultados.

Palavras-chave: Fluorescência. Polarização. Citros.

Referências:

1 SHIBAYAMA, M.; SAKAMOTO, T.; KIMURA, A. A multiband polarimetric imager for field crop survey. Instrumentation and preliminary observations of heading-stage wheat canopies.

Plant Production Science, v. 14, n. 1, p. 64-74, 2011.

2 SANKARAN, S.; EHSANI, R.; ETXEBERRIA, E. Mid-infrared spectroscopy for detection of Huanglongbing (greening) in citrus leaves. **Talanta**, v. 83, n. 2, p. 574-581, 2010.

PG206

Relaxação magnética em ligas magnéticas diluídas

Magnetic relaxation in dilute magnetic alloys

ZAWADZKI, Krissia de¹; OLIVEIRA, Luiz Nunes de¹

krissia.zawadzki@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Na maioria dos metais, espera-se que o aumento de temperatura seja acompanhado por um aumento na resistividade. Conforme a temperatura aumenta no metal, cada vez mais vibrações de seus núcleos são excitadas, levando a um espalhamento dos elétrons de condução que resulta em aumento da resistividade. A baixas temperaturas, entretanto, verificou-se que a resistividade de muitos metais passa por um mínimo e acaba crescendo a medida que a temperatura diminui. Essa descoberta intrigou os físicos por cerca de 30 anos, até que em 1964 Jun Kondo propôs uma explicação para o fenômeno, hoje conhecido como *Efeito Kondo*; a resistividade residual existente em alguns metais é atribuída à presença de impurezas, defeitos ou vacâncias. (1) Impurezas magnéticas contribuem para aumentar a resistividade a baixas temperaturas, enquanto que a contribuição de impurezas não magnéticas e vacâncias, embora exista, não cresce com a temperatura. Assim, quando uma impureza magnética (Fe, por exemplo) se encontra em um ambiente metálico não magnético (Au, por exemplo), surge uma interação antiferromagnética entre os elétrons do metal e os da impureza. Em torno desta, no regime de baixas temperaturas, forma-se uma região dinamicamente polarizada, tradicionalmente chamada de *nuvem de Kondo*. Muitos trabalhos propuseram estimar o raio dessa nuvem através de abordagens teóricas e experimentais, porém as divergências entre os resultados impediu que se chegasse a um valor conclusivo. (2) Uma possível explicação para as divergências estaria na noção de que o raio da nuvem é sempre o mesmo, independentemente da geometria, uma ideia que este trabalho quer questionar. Desse modo, propomos um método para estimar o tamanho da nuvem de Kondo em uma liga metálica diluída (metais hospedeiros com pequena concentração de impurezas) em uma geometria particular. Estudaremos a dependência da taxa de relaxação longitudinal $1/T_1$ de uma ponta de prova magnética em função da temperatura T e da sua distância $\vec{R}$ à impureza. (3) Vamos considerar um metal hospedeiro semi-infinito na direção z , com a impureza localizada em $\vec{d}$ a uma distância d do plano que limita o metal com origem no mesmo. Esperamos fisicamente que a taxa de relaxação dependa da relação entre $\vec{R}$ e $\vec{d}$ e forneça informação direta sobre a estrutura espacial da nuvem de blindagem de Kondo.

Palavras-chave: Efeito Kondo. Propriedades eletrônicas. Relaxação magnética.

In most metals, when temperature increases so does resistivity. That is because higher temperatures yields wider nuclei vibrations, increasing their effective scattering cross section for conduction electrons. As the temperature increases in a metal, more and more vibrations of their nuclei are excited, given rise to a scattering of the conduction electrons which results in a resistivity increase. However, in many metals at low temperatures is verified that resistivity reaches a minimum and then increases as the temperature is lowered. This discovery puzzled

physicists during 30 years until 1964, when Jun Kondo proposed an explanation to the phenomenon known today by *Kondo Effect*; the residual resistance in some metals could be related to the presence of impurities, defects or vacancies. (1) Magnetic impurities contribute to the increase of resistivity at low temperatures, while the contribution of non magnetic impurities and vacancies (although existing) do not present this increasing behavior. When a magnetic impurity (Fe, e.g.) is in a non magnetic metallic mean (Au, e.g.), appears an antiferromagnetic interaction between the metal electrons and the impurity. Around the impurity, at low temperatures, this interaction gives rise to a polarized dynamic region, traditionally known as *Kondo screening cloud*. Many researchers proposed to estimate the ratio of the Kondo cloud both by theoretical and experimental approaches. (2) However, the divergence between the results did not allow for a value to the cloud ratio to be determined. A possible explanation to these divergences lie in the notion that the cloud's ratio is always the same apart of the geometry, an idea which this work will question. We propose a method to estimate the size of the Kondo cloud in a dilute metallic alloy, which is a host metal with low concentration of impurities, in a special geometry. We will study the longitudinal relaxation rate $1/T_1$ of a probe as function of the temperature T as well as the distance $\vec{R}$ from a magnetic impurity in a nonmagnetic host. (3) We will consider a metallic host semi-infinite in the z direction with the impurity located at $\vec{d}$ from the limiting plan. We hope to find a dependence between the relaxation rate and the positions $\vec{R}$ and $\vec{d}$ which could also give direct information about the spacial structure of the Kondo screening cloud.

Keywords: Kondo effect. Electronic properties. Magnetic relaxation.

Referências:

- 1 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. **Progress in Theoretical Physics**, v. 32, n. 1, p. 37-49, 1964.
- 2 BORDA, L. Kondo screening cloud in a one-dimensional wire: numerical renormalization group study. **Physical Review B**, v. 75, n. 4, p. 041307, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.041307.
- 3 YOSHIDA, M.; SERIDONIO, A. C.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance for the single-electron transistor. **Physical Review B**, v.80, n. 23, p. 235317, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevB.80.235317.

Índice de Autores

A

ADESSO, Gerardo	95
AGE, Paulo Rogerio Pereira S	49
ALBUQUERQUE, Rodrigo Queiroz	127
ALCARAZ, Francisco Castilho	138
ALMEIDA, Gustavo Foresto Brito de	93
ALMEIDA, Lirio Onofre Baptista de	94
ALMEIDA-SILVA, Isabela	95
ALTEI, Wanessa Fernanda	97
AMANCIO, Diego Raphael	99
AMARAL, Thiago Martins	100
AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de	128
ANDRADE, Cintia Teles de	101
ANDREETA, Mariane Barsi	103
ANDRICOPULO, Adriano Defini	97, 180, 183, 217, 223, 233, 266, 317, 354
ANJOS, Rita de Cassia dos	104
ANTONELLI, Eduardo	100
AOKI, Pedro Henrique Benites	93
AOKI, Sergio	181
ARAÚJO, Ana Paula Ulian de	83, 86, 158, 237, 238, 367
ARAUJO-FERREIRA, Arthur Gustavo	105
ASSIRATI, Lucas	106
AUCCASE, Ruben	95, 105
AURICHIO, Vinicius Henrique	107
AVILA, Oriana Ines	109

B

BACHEGA, José Fernando Ruggiero	110
BAGNATO, Guilherme de Guzzi	112, 356
BAGNATO, Vanderlei Salvador .. 56, 60, 67, 70, 80, 82, 101, 112, 129, 134, 148, 195, 263, 268, 282, 289, 300, 309, 319, 327, 355, 356, 360, 370	
BALIEIRO, Fabiano de Carvalho	258
BALLESTEROS, Camilo	113
BARDIVIESSO, Leandro Godoi	114
BARUFFI, Marcelo Dias	206
BASSO, Luís Guilherme Mansor	116
BASTOS, Carlos Maciel de Oliveira	118
BATISTA, João Luiz Bunoro	119
BATISTA, Mariana Raquel Bunoro	120
BATISTA, Renata da Fonseca Moraes	122
BELLIDO, Jose Alfredo	284
BELLINI, Natália Karla	50, 176
BERNARDES, Amanda	123
BERNARDES, Esmerindo de Sousa	276
BERNARDI, Maria Inês Basso	59, 126, 172

BERNARDINELLI, Oigres Daniel	124
BERTÉ, Rodrigo	125
BETTINI, Jefferson	324
BEZERRA, Débora Morais	298
BOGNI, Simoni Camila	169
BOLZANI, Vanderlan da Silva	97
BONACIN, Rafael	59, 126
BONAGAMBA, Tito José	95, 103, 105, 128, 234, 258, 281, 297
BORGES, Ben-Hur Viana	340
BORGES, Júlio César	299
BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini	114
BOTELHO, Moema de Barros e Silva	127, 292
BRANDÃO NETO, José	302, 326, 352
BRAZ, Daniel Cesar	128
BROCHINI, Ludmila	57
BRUNO, Odemir Martinez	106, 145, 184, 194, 283, 365
BUZZA, Hilde Harb	80, 129
C	
CÂMARA, Amanda Souza	150
CABRAL, Jader de Souza	130, 193, 205
CAFACE, Raphael Antonio	131
CAMARGO, Andrea Simone Stucchi de	127, 292
CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha	169, 229, 252
CAMILLO, Cesar Moisés	187
CAMPOS, Tiago de	132
CANCINO, Juliana	154
CANDIDO, Denis Ricardo	133
CANDURI, Fernanda	299
CARACANHAS, Mônica Andrioli	82, 112, 134, 360
CARDOSO, Andrea Rodrigues	135
CARDOSO, Marcos Roberto	93
CARUSO, Jeremias Sulzbacher	137
CARVAJAL JARA, Diego Alejandro	138
CARVALHO JUNIOR, Paulo de Sousa	140
CARVALHO, Camila Miranda	142
CARVALHO, Carina Miranda	144
CASANOVA, Dalcimar	145
CASSAGO, Alexandre	326
CASTELO BRANCO, Cora	147, 356
CASTILHO, Patrícia Christina Marques	148, 282
CASTRO NETO, Jarbas Caiado de	208, 261, 320
CAVINI, Italo Augusto	51
CENSONI, Luciano	152
CENTURION, Lilian Maria Pessoa da Cruz	154
CHAVES, Anderson Silva	156
CHELESKI, Juliana	88, 367
CIOL, Heloisa	158
CLAVIJO, Juan Carlos Tenorio	159

COBO, Márcio Fernando	160
COELHO, Felipe Bessa	278, 333
COELHO, Fernando	317
COLETTA, Vitor Carlos	162
COLNAGO, Luiz Alberto	235
COLUSSI, Francieli	280
COMBARIZA CRUZ, Ernesto	262
COMIN, Cesar Henrique	163
CONCEIÇÃO, Fernando Rodrigues da	162
CONSTANTINO, Carlos José Leopoldo	93
CORAZZA, Adalberto Vieira	263
CORRÊA, Débora Cristina	164
CORRÊA, Rodrigo Rafael Melaré	166
CORREA, Daniel Souza	362
CORSI, Waldomiro Thiago	169
COSCI, Alessandro	289
COSTA FILHO, Antonio José da	116, 206
COSTA, Luciano da Fontoura	93, 99, 119, 163, 164, 171, 200, 296, 319, 335, 369
COURTEILLE, Philippe Wilhelm	232, 240, 311
COUTINHO, Douglas José	168
CRUVINEL, Paulo Estevão	207, 296, 321
CUNHA, João Victor de Souza	53

D

D'EURYDICE, Marcel Nogueira	128
D'MUNIZ, Humberto Pereira	326
DA SILVA, Danilo Mendes Delfino	278
DA SILVA, Geisiane Rosa	54
DA SILVA, Jéssica Thaíse Batista	294
DA SILVA, Juarez Lopes Ferreira	49, 156, 185, 303
DA SILVA, Marco Tulio Alves	63
DABUL, Andrei Nicoli Gebieluca	169
DE CASTRO, Leonardo Andreta	170
DE MARCO, Ricardo	77, 198, 260, 275, 302, 326
DEAZEVEDO, Eduardo Ribeiro	95, 124, 160, 174
DIAS, Marcio Vinicius Bertacine	177
DIPOLD, Jessica	55
DORO NETO, Carlos	171
DOS SANTOS, Amanda Luizetto	54
DYSZY, Fábio Henrique	206

E

ECKERT, Hellmut	239, 292
EGUES, José Carlos	133, 197, 271
ELLENA, Javier Alcides	68, 140, 159, 265, 331
ESCANHOELA JUNIOR, Carlos Augusto	172
ESCOLA, João Paulo Lemos	173
ESPIRITO SANTO, Melissa Cristina	174
ESTRADA, Ruben Aucçaise	258

ETCHEVERRY, Susana	337
EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti	50, 176

F

FABBRI, Renato	369
FAIM, Livia Maria	177
FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de	132, 179
FARIA, Roberto Mendonça	168, 216, 351, 365
FARIAS, Kilvia Mayre	268, 356, 370
FERNANDES, Daniara Cristina	317
FERNANDES, Tácio Vinício Amorim	116
FERREIRA, Dilley	56
FERREIRA, Edilene	142
FERREIRA, Ednaldo José	294
FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes	180
FERREIRA, Luiz Agostinho	107, 214
FERRI, Fabio Aparecido	340
FIGUEIREDO, Alessandra	181
FIGUEIREDO, Eduardo Barretto	142
FIGUEREDO, Tarcisio Rocha	182
FIORAVANTI, César Maschio	183
IORESE, Marcela Senne	263
FLORINDO, João Batista	184
FONTANA, Carla Raquel	109
FONTANARI, José Fernando	273
FONTES, Sérgio Rodrigues	234
FORTULAN, Carlos Alberto	234
FORTUNATO, Thereza Cury	56, 355
FOSTER, David	107
FREIRE, Guilherme	278, 333
FREIRE, Rafael Luiz Heleno Freire	185

G

GALVEZ-LOPEZ, Maria Dolores	127
GARCIA RIVERA, Victor Anthony	340
GARCIA, Célia Regina da Silva	218, 243
GARRATT, Richard Charles	51, 110, 326
GIR, Elucir	252
GIROLAMI, Davide	95
GODOY, Andre Schutzer de	187
GOLLINO, Felipe	189
GOMEZ, Eliceo Cortes	191
GOMEZ, Leonardo	213
GONÇALVES, Luis Felipe	130, 193, 205
GONÇALVES, Wesley Nunes	194
GONZALEZ, Jose Pedro Donoso	337
GOTO, Leandro Seiji	367
GRECCO, Clóvis	195, 289
GUALBERTO, Alan Rodrigo Marinho	100

GUARIENTO, Rafael Tuma	57
GUIDO, Rafael Victório Carvalho	183, 212, 218, 243
GUIDO, Rodrigo Capobianco	173, 290
GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo	131, 162, 181, 363
H	
HACHIYA, Marco	197
HERNANDES, Antonio Carlos	100, 227
HORJALES, Eduardo	110, 150, 358
HORNOS, José Eduardo Martinho	287
I	
INADA, Natalia Mayumi	327
J	
JACINTO, Daniele Santini	198
JACQUES, Osvaldo Vargas	200
JESUS, Lílían Menezes	201
JUSTO, Marina Jeaneth Machicao	203
K	
KALBITZER, Hans Robert	51
KOBERLE, Roland	345
KONDO, Jorge Douglas Massayuki	130, 193, 205
KUBOTA, Thiago Massaiti Kuboyama	294
KUMAGAI, Patricia Suemy	206
KURACHI, Cristina	56, 65, 80, 101, 129, 195, 263, 289, 309, 319, 327, 355
L	
LA SCALLA JÚNIOR, Newton	142
LAIA, Marcos Antonio de Matos	207
LANG, Rodrigo Guedes	58
LEITE, José Roberto de Souza de Almeida	125
LENCIONE, Diego	208
LIBERATO, Marcelo Vizoná	210
LIMA JUNIOR, José Jorge Dantas de	93
LIMA, Cesar Augustus Uliana Lima	211
LIMA, Gustavo Machado Álvares	212
LIMA, Marisa Aparecida de	124, 174, 213
LIMA, Raquel de Castro Rodrigues	59
LIZARELLI, Rosane de Fátima Zanirato	67
LOURENÇO, Gustavo Vilaça	278, 333
LUCHINI, Gabriel	214
M	
M'PEKO, Jean Claude	126, 201
MACEDO, Joci Neuby Alves	53, 86
MACIEL, Adeilton Pereira	298
MACIEL, Alexandre de Castro	216
MAGALHÃES, Luma Godoy	217

MAGON, Cláudio José	329
MAGRINI, Fernando Peron	187
MAIA, Lauro June Queiroz	227
MAIA, Leonardo Paulo	241, 313
MALHEIROS, Jackeline Moraes	61
MALUF, Fernando Vasconcelos	110, 218, 243
MANZINE, Livia Regina	324
MARANGONI, Bruno Spolon	220
MARANGONI, Valeria Spolon	221
MARCASSA, Luis Gustavo	130, 193, 205, 220, 372
MARCELLO JUNIOR, Hyllo Baeta	169
MAREGA JUNIOR, Euclydes	148, 189, 340, 348
MARINO, Áttis Vinícius Martines	60
MARQUES, Márcia Renata Hidalgo	61
MARTINEZ, Leandro	120, 152, 245
MARTINEZ, Odemir Bruno	203
MARTINS, Julia Mara	114
MARTINS, Mateus José	166, 278, 333
MASCARENHAS, Yvonne Primerano	54
MASTELARO, Valmor Roberto	172
MATIAS, Paulo	222
MATOS, Karina Silvia	223
MATSUYAMA, Bruno Yasui	224
MAXIMO, Carlos Eduardo	226
McQUEEN-MASON, Simon	213
MENDES, Alessandra Carla	227
MENDES, Luís Felipe	116
MENDES, Tereza Cristina da Rocha	322
MENDONÇA, Cleber Renato	93, 109, 182, 301, 362
MENEGATTI, Carlos Renato	220
MERCADO, Wilson Enrique Rosado	228
MERLO, Thaís Panhan	229
MESQUITA, Nathalya Cristina de Moraes Roso	231
MIGUEZ, Maria Luiza	232
MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira	74, 142, 294
MIRANDA, Paulo Barbeitas	72, 251
MISOGUTI, Lino	255, 256, 289
MODA, Tiago Luiz	223
MONTANHA, Érica Azzolino	233
MONTRAZI, Elton Tadeu	234
MORAES, Alan Raphael de Farias Klein	63
MORAES, Tiago Bueno de	235
MORAIS, Sinara Teixeira do Brasil	237
MOREIRA, Heline Hellen Teixeira	238, 358
MOREIRA, Raphaell	239
MORIYA, Paulo Hisao	240
MORIYAMA, Lilian Tan	355
MOSQUEIRO, Thiago Schiavo	241

MOUSSA, Miled Hassan Youssef	191, 226, 228, 308, 359, 366
MULINARI, Evandro José	243
MUNIZ, Heloisa dos Santos	245
MUNIZ, João Renato Carvalho	123
MUNIZ, Sérgio Ricardo	81, 112, 147, 148, 282
MUNTE, Claudia Elisabeth	51, 83, 249, 358

N

NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus	170
NASCIMENTO, Alessandro Silva	229, 315
NASCIMENTO, Otaciro Rangel	337
NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles	79, 88, 135, 224, 231, 247, 342
NEUBER, Pedro Michelao	249
NOGUEIRA, Andrea Regina dos Santos	174
NOGUEIRA, Marcelo Saito	65
NONATO, Maria Cristina	206
NOVAIS, Paulo César	309
NOVOTNY, Etelvino Henrique	258

O

OITICICA, Pedro Ramon Almeida	251
OKADO, Jéssica Baleiro	252
OLIVA, Glaucius	218, 299
OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de	254
OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de	99, 233, 350, 364
OLIVEIRA, Anderson Roberto de	255
OLIVEIRA, André Orlandi de	256
OLIVEIRA, Flávio Frois de	257
OLIVEIRA, Ivan	95
OLIVEIRA, Luiz Nunes de	257, 373
OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo	258, 281
ONCEBAY SEGURA, Charlie	259
ONNIS, Irene Ignazia	85
ORCIA, Débora	260
ORTEGA, Tiago Almeida	261
OSÓRIO, Sérgio Paulo Amaral	340

P

PAIVA, Fernando Fernandes	61, 329
PAIVA, Rafael Rothganger de	268, 370
PALOMINO SALCEDO, David Leandro	262
PAOLILLO, Alessandra Rossi	263
PAOLILLO, Fernanda Rossi	263
PARMESANO, Thiago Nogueira	67
PASCHOAL, Carlos William de Araújo	298
PASCUTTI, Pedro Geraldo	116
PAULA, Karina de	265
PAULI, Ivani	266
PEDROZO-PENAFIEL, Edwin	268, 370

PELLEGRINI, Vanessa de Oliveira Arnoldi	270
PENTEADO, Poliana Heiffig	271
PEPINO, Rebeka de Oliveira	68, 331
PEREIRA, Humberto D'Muniz	177, 302, 352
PEREIRA, Rodrigo Gonçalves	76, 343
PERES, Lucas Vieira Guerreiro Rodrigues	273
PERON, Thomas Kauê Dal Maso	274
PHILIPPSEN, Gisele Strieder	275
PINTO, Andressa Patricia Alves	83
PINTO, Diogo de Oliveira Soares	347
PINTO, Reynaldo Daniel	57, 316, 345
PIOTROWSKI, Maurício Jeomar	156
PIRES, Diego Paiva	276
PIZETTA, Daniel Cosmo	278, 333
POLIKARPOV, Igor ..	123, 124, 162, 174, 187, 210, 213, 270, 280, 293, 315, 361
POLLI, Roberson Saraiva	281
PORTAPILLA, Gisele Bulhões	63
PORTUGAL, Rodrigo Villares	324
POVEDA-CUEVAS, Freddy Jackson	148, 282
PRADO NETO, Elias Ximenes do	283
PRADO, Raul	284
PRATA, Guilherme Nery	287
PRATAVIEIRA, Sebastião	70, 101, 195, 289

Q

QUEIROZ, Gylherme Emmanuel Tagliaferro de	290
QUEIROZ, Thiago Branquinho de	292

R

RAMIA, Marina Paglione	293
RANULFI, Anielle Coelho	294
REGASINI, Luis Octavio	97
REQUENA, Michelle Barreto	70
REZENDE, Camila Alves de	124, 162
RIGO, Gustavo Vrech	296
RIMOLI, Caio Vaz	72
RIVERA ASCONA, Christian	297
RODRIGUES FILHO, Ubirajara Pereira	254
RODRIGUES, Carlos Alberto	93
RODRIGUES, Francisco Aparecido	274
RODRIGUES, João Elias Figueiredo Soares	298
RODRIGUES, Nathalia de Campos	299
RODRIGUES, Phamilla Gracielli Sousa	300
RODRIGUEZ, Ruben Dario Fonseca	301
ROMANELLO, Larissa	302, 326, 352
ROMANO, Renan Arnon	74
RONDINA, Gustavo Garcia	303
RONQUI, José Ricardo Furlan	306
ROSSETO, Flavio Rodolfo	247

ROSSETTI, Rafael Furlan	308
S	
SABINO, Luis Gustavo	309
SALAS, Andres Rodriguez	311
SANCHES, Edgar Aparecido	54
SANTAMARIA, Julian Andres Jaimes	313
SANTOS, Cleber Hilário dos	74
SANTOS, Ednilson	112
SANTOS, Francisco Ednilson Alves dos	360
SANTOS, Jaciara Cássia de Carvalho	314
SANTOS, Jademilson Celestino dos	315
SANTOS, Jessica dos	316
SANTOS, Maria Auxiliadora Morim	174
SANTOS, Millena Logrado dos	76
SANTOS, Ricardo Nascimento dos	97, 317
SANTOS, Yuri Volpato	77
SARTHOUR, Roberto	95
SAUCE, Rafael Silva	294
SBRISSA NETO, David Antonio	319
SCADUTO, Lucimara Cristina Nakata	320
SCANNAVINO JR., Francisco de Assis	321
SCHNEIDER, José Fabian	254
SERENONE, Willian Matioli	322
SERRÃO, Vitor Hugo Balasco	324
SERROR, Pascale	229
SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo	356
SILVA NETO, Antônio Marinho da	326
SILVA, Ana Paula	327
SILVA, Cíntia Maira Pereira	329
SILVA, Cecília Carolina Pinheiro da	68, 331
SILVA, Danilo Mendes Dias Delfino	333
SILVA, Everton Edésio Dinis	79
SILVA, Filipi Nascimento	335
SILVA, Flávio Henrique	51, 270
SILVA, Igor d'Anciães Almeida	337
SILVA, Ivan Rosa e	177, 324, 339
SILVA, Lucas Vale da	80
SILVA, Marcelo Pereira da	365
SILVA, Marco Túlio Alves da	249, 339
SILVA, Otávio de Brito	340
SILVA, Paulo Cesar Ventura da	81
SILVA, Rodrigo de Oliveira	128
SILVA, Ronaldo Santos	201
SILVA, Sumária Sousa	342
SILVEIRA, Hudson Pimenta	343
SILVERIO, Carolina Menezes	345
SIPAHI, Guilherme Matos	118, 132, 179
SIQUEIRA JUNIOR, José Roberto	350

SIQUEIRA, Jonathas de Paula	255
SIU LI, Maximo	227
SLAETS, Jan Frans Willem	94, 122, 222
SLAPIK, Aleksandra	322
SMAIRA, André de Freitas	82, 134
SOARES, Hendrik Marques	346
SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico	95, 347
SOARES-PINTO, Diogo	95, 259
SOBREIRA, Fernando Wellysson de Alencar	348
SOUSA, Marcos Antonio Moura de	350
SOUSA, Washington da Silva	351
SOUZA, Anacleto Silva de	83
SOUZA, Iberê Oliveira Kuntz de	85
SOUZA, Juliana Roberta Torini de	352
SOUZA, Mariana Laureano de	354
SOUZA, Vitor de	55, 58, 104, 284, 346
STRINGASCI, Mirian Denise	56, 355
SUKHAREV, Maxim	348

T

TANNÚS, Alberto	166, 278, 329, 333
TANOUE, Fernando Takeshi	86
TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti	356
TEIXEIRA, Francesco Brugnera	358
TEIZEN, Víctor Fernandes	359
TELES, Rafael Poliseli	360
TELLES, Gustavo Deczka	60, 112, 356
THIEMANN, Otavio Henrique	50, 63, 176, 177, 180, 249, 324, 339
TOMAZINI JÚNIOR, Atílio	361
TORINI, Juliana Roberta	302, 326
TORRES, Naiara Utimura	88
TRAVIESO, Gonzalo	137, 306, 319, 369
TRIBUZI, Vinicius	362
TSUTAE, Fernando Massayuki	363

U

USAJ, Gonzalo	197
---------------------	-----

V

VALENCIA, Camilo Akimushkin	364
VALENCIA, Carolina Elisa Guillen	365
VALLI, Marilia	97
VAN HEEL, Marin	324
VANZELLA, Daniel Augusto Turolla	211
VEIGA, Rodrigo Soares	366
VERCIK, Andrés	350
VIDOTO, Edson Luiz Gea	128, 258, 278, 329, 333
VIEIRA, Débora Fernanda	367
VIEIRA, Nirton Cristi Silva	181

VIEIRA, Vilson	369
VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro	74, 294
VIVANCO, Franklin Adán Julca	268, 370
VOLLET-FILHO, José Dirceu	70, 101, 309
VOLPON, Antonia Garcia Torres	114

W

WEINER, John	340
WETTERICH, Caio Bruno	372
WIGGERS, Helton José	79

Z

ZAKRZEWSKI, Wojtek	214
ZANATTA, Antônio Ricardo	340
ZAWADZKI, Krissia de	373
ZERAIK, Ana Eliza	77
ZILIO, Sérgio Carlos	255, 256
ZUCOLOTTO, Valtencir	113, 125, 144, 154, 181, 221, 314



Semana Integrada do
Instituto de Física de São Carlos

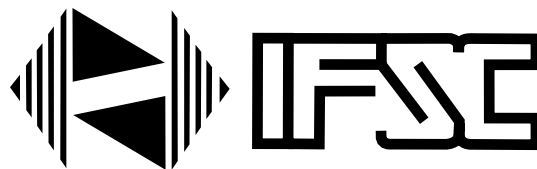
Agradecimentos

A todos os alunos, membros e ex-membros da comissão de organização pelo esforço, empenho e dedicação na organização deste evento. Também aos alunos que prestigiaram o evento, motivando nossos esforços.

Aos professores e funcionários que apoiaram e colaboraram com o sucesso do evento.

Ao Instituto de Física de São Carlos, SBI ifsc, PRCEU, CDCC, empresas participantes e ao USP Recicla.

Comissão Organizadora
da II SIFSC.



SBI ifsc



Centro de Divulgação
Científica e Cultural



PRÓ-REITORIA DE
CULTURA E EXTENSÃO
UNIVERSITÁRIA

USP