SIFSC07

SEMANA INTEGRADA
DA GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

LIVRO DE RESUMOS

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

VII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
Instituto de Física de São Carlos
2017

Universidade de São Paulo

Reitor Marco Antonio Zago
Vice-Reitor Vahan Agopyan

Instituto de Física de São Carlos

Diretor Tito José Bonagamba
Vice-Diretor Richard Charles Garratt

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 Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(7: 18 set. – 22 set.: 2017: São Carlos, SP.).
Livro de resumos/ Organizado por Nicolas Morazotti [et al].São Carlos: IFSC, 2017.
381p.

Texto em português.

1.Fisica. I. Morazotti, N. A. C.II. Titulo.

ISBN 978-85-61958-20-6 CDD 530

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 7

Coordenadores

Prof. Dr. Tito José Bonagamba
Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Valmor Roberto Mastelaro
Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Tereza Cristina da Rocha Mendes
Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Ana Flávia Silveira de Camargo
Beatriz Saiani Bellini
Bernardo Duarte Rosa
Gabriel dos Santos Araujo Pinto
Gabriela Ruiz
Humberto Ribeiro de Souza
Jader Oliveira Leite Filho
João Gabriel Gonçalves Chiquito
Luana de Souza da Costa
Murilo Franchi
Nícolas André da Costa Morazotti
Rafael Francisco Santiago de Souza
Renato Mariano Rissi
Roberto Furuta
Vicente Mattos
Vitoria Baldan

Carta de apresentação

Já em sua sétima edição, a Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos - SIFSC, organizada por alunos de graduação e pós-graduação, com apoio da diretoria e de todos os servidores do instituto, promove como sempre atividades acadêmicas e culturais, garantindo a integração de toda a comunidade. São oferecidas palestras acadêmicas, palestras de empresas, mesas redondas e também espaço para a comunidade expor seu lado artístico-cultural.

Como de costume, uma das principais atrações da SIFSC é o Workshop da Pós-Graduação, já em sua 21ª edição, incluído no evento em 2011. Além de apresentações da Pós-Graduação, alunos de iniciação científica poderão apresentar seus trabalhos, sendo que a etapa local do XXV Simpósio Internacional de Iniciação Científica e Tecnológica da USP ocorre conjuntamente ao Workshop. Durante o Workshop, todos os estudantes são avaliados por professores e pós-doutorandos da área, a fim de acompanhar a evolução em seu projeto. O Workshop é de extrema importância na avaliação da CAPES, em que o instituto mantém nível de excelência por diversos anos.

Não sendo apenas de cunho acadêmico, o evento também serve como uma interface dos estudantes com o mercado de trabalho fora da universidade. Estimamos a participação de em torno de 400 pessoas, além de palestrantes, representantes de empresas e avaliadores. Esta interface, assim, se torna fundamental para ambos os lados, visto a quantidade de parcerias do instituto com empresas privadas.

Todos os alunos do instituto interessados poderão concorrer uma vaga no prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas, nomeado em homenagem à uma das pioneiras da física em São Carlos, em que serão prestigiados os melhores trabalhos de cada etapa: graduação, mestrado e doutorado. Após uma fase preliminar, os trabalhos são apresentados à uma banca com representantes de todas as grandes áreas de pesquisa do instituto.

Toda a Comissão Organizadora agradece a diretoria do IFSC-USP, a Comissão de Graduação e a Comissão de Pós-Graduação pelo apoio. Agradecemos também a todos os avaliadores e palestrantes, sem os quais o evento não seria possível. Agradecemos a presença de todos os participantes. Agradecemos especialmente as bibliotecárias do instituto, que dedicam árduo trabalho e esforço na padronização e adequação do livro de resumos.

Comissão Organizadora da SIFSC 7

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Obtenção de nanoestruturas metálicas em substratos semicondutores por litografia por feixes de elétrons
AKAMATSU, D. Y.; MAREGA JÚNIOR, E. 31

IC2 - Avaliação das atribuições de causa para sucesso e fracasso escolar de alunos dos cursos de física
ALMEIDA, N. S. de; HIROTA, L. da C. B.; MUNIZ, S. R.; PAIVA, F. F. 32

IC3 - Non-Markovian processes in the two Bronwnian particle model
BARROS, I. de A.; BRITO, F. B. de 33

IC4 - Estudo de técnicas de aprisionamento óptico baseadas em modulação acusto-óptica
CALVELLO, V. S.; SEGURA, C. O. O.; SILVA, P. F.; MUNIZ, S. R. 35

IC5 - Espectroscopia Raman no diagnóstico de doenças relacionadas ao envelhecimento em diferentes tecidos: cristalino, pele e osso
CAVALLINI, D.; NASCIMENTO, G. F. do; MATTOS, V. S.; MATOS, L. de; PAOLILLO, F. R.; CASTRO NETO, J. C. de 36

IC6 - Modelo simplificado para decaimentos do Higgs e dados do LHC
BOTELHO JUNIOR, M. V.; BOITO, D. R. 37

IC7 - Caracterização óptica de ácidos nucleicos a partir de plásmons poláritons de superfície
CLEMENTINO, L. O. D.; MAREGA JÚNIOR, E. 38

IC8 - Cristalização do vidro Bi2O3.B2O3 induzida por laser de femtossegundos
CORRADINE, G.; ALMEIDA, J. M. P. de 39

IC9 - Estudo de métodos de RMN no domínio do tempo em baixo campo para investigação de sistemas poliméricos
COSTA, R. G. L.; FILGUEIRAS, J.; DEAZEVEDO, E. R. 40

IC10 - Caracterizando cidades do mundo por sua topologia
DOMINGUES, G. S.; SILVA, F. N.; COMIN, C. H.; COSTA, L. da F. 42

IC11 - Estudo de potenciais ópticos produzidos por holografia digital
DONATO, M. H. F.; MUNIZ, S. R. 43

IC12 - Toxicidade aguda e geração de espécies reativas ao oxigênio em zebrafish (Danio rerio) expostos à nanorods de ouro
DRESSLER, B.; SOUZA, J. P.; ZUCOLOTTO, V. 44

IC13 - Implementação de métodos numéricos para análise de sinais de Ressonância Magnética Nuclear no domínio do tempo
FENERICK, R.; MORAES, T. B.; DEAZEVEDO, E. R. 45

IC14 - Transferência de nanopartículas por indução a laser
FERREIRA, P. R.; ALMEIDA, J. M. P. de; MENDONÇA, C. R. 46

IC15 - Otimização de uma Armadilha Magneto-Óptica de Estrôncio
FRANKLIN, L. C.; COURTEILLE, P. W. 47

IC16 - Estudo do Efeito Vascular da Terapia Fotodinâmica com o uso de diferentes curcuminas
FREITAS, L. C. F. de; BUZZÁ, H. H.; BAGNATO, V. S. 48

IC17 - Impedimetric biosensors based on screen-printed interdigitated electrodes coated with carbon nano-onions: a new platform for detecting cancer biomarkers
FURUTA, R. H. M.; IBÁÑEZ-REDÍN, G. G.; WILSON, D. M.; MELENDEZ, M. E.; FREGNANI, J. H. T. G.; CARVALHO, A. L.; GONÇALVES, D.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de 49

IC18 - Desenvolvimento e implementação de protocolos de processamento para quantificação de perfusão sanguínea cerebral utilizando Arterial Spin Labeling
GALDIANO, M. D. B.; PAIVA, F. F. 50

IC19 - Avaliação morfo-histológica do tubo digestório de larvas do Aedes aegypti submetidas ao fotossensibilizador curcumina (Curcuma longa L.)
GARBUIO, M.; SOUZA, L. M. de; VENTURINE, F. P.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S.; BLANCO, K. C. 52

IC20 - Pyrochlore supergroup minerals Raman spectroscopy
GARCIA, G. S.; ANDRADE, M. B. de; QUEIROZ, A. A. A. E. de; ELLENA, J. A. 53

IC21 - Desenvolvimento, síntese supramolecular e caracterização de novas formulações sólidas de antidepressivos
GONÇALVES, L.; ELLENA, J. A. 55

IC22 - Estudos sobre a possibilidade de detecção indireta de matéria escura
KARASAWA, E. G.; SOUZA, V. de 56

IC23 - Espaço Interativo de Ciências (EIC) do CIBFar: educação e difusão de ciências para São Carlos e região
KLEIN, A. K.; CAMARGO, I. L. B. C.; ARAUJO, A. T. de; SANTOS, G. C. 58

IC24 - Jogos educativos como uma estratégia de prevenção de doenças
KUNITAKE, P. Y.; COSTA, G. G. da; BELTRAMINI, L. M. 59

IC25 - Efeitos termográficos da estimulação transcranial a laser e estimulação elétrica neuromuscular em pacientes com acidente vascular encefálico (AVE)
LUCCAS, G. A. A.; PAOLILLO, F. R.; CASTRO NETO, J. C. de 60

IC26 - Propriedades estruturais e eletrônicas de quasecristais
MAGNO, G. F.; ANDRADE, E. de C. e 61

IC27 - Biossensores amperométricos Quitosana/Tirosinase para detecção de Bisfenol A
MARION, S. C. F.; CAVALHEIRO, E. T. G.; CERVINI, P.; GONÇALVES, D.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de..... 62

IC28 - Supernovas: origem ou não de raios cósmicos?
MARTINS, L. M.; VECCHI, M. 63

IC29 - Identificação de novos candidatos a agentes antitumorais
MARTINS, C. T.; SILVA, E. M. G.; MAGALHÃES, L. G.; RUSSOWSKY, D.; ANDRICOPULO, A. D..... 64

IC30 - Sistemas de átomos frios e condensados de Bose-Einstein: instrumentação para diagnóstico e controle
MAZO, P. L.; CASTILHO, P. C. M.; GUTIERREZ, E. D. M.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S.; DUQUE, H. V.; NAVARRO, J. C. A..... 65

IC31 - Rotação não linear da polarização elíptica: refração e absorção de dois fótons
MELHADO, M. S.; MISOGUTI, L. 66

IC32 - Preparação de células fotovoltaicas orgânicas usando solventes verdes
MIRANDA, G. da S.; SOUSA, L. M. de C.; TORRES, B. B. M.; BALOGH, D. T.; FARIA, R. M.... 67

IC33 - Localização de Anderson de luz em 3D: Relação espaço-temporal
MOREIRA, N. A.; BACHELARD, R. P. M. 68

IC34 - Análise estrutural e funcional das principais xilanases identificadas nos estudos de proteômica da bactéria termofílica e lignocelulolítica, Thermogemmatispora T81
NAKADA, P. J. T.; TOMAZINI JÚNIOR, A. 70

IC35 - Influência da esfingomielina na permeabilidade do fármaco cloridrato de gencitabina nos modelos de membrana
NASCIMENTO, G. F. do; MATERÓN, E. M.; FARIA, R. C.; SHIMIZU, F. M.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de 71

IC36 - Uso de técnicas de mineração de dados e espectroscopia de imagem para detecção de doenças em citros
NEVES, R. F. de O.; WETTERICH, C. B.; SOUSA, E. P. M. de; MARCASSA, L. G. 72

IC37 - Influência da radiação ultravioleta no envelhecimento do cristalino humano e na formação da catarata relacionada à idade
NEVES, N. I. de S.; CASTRO NETO, J. C. de; MATOS, L. de; SOUZA, R. F. S. de 73

IC38 - Caracterização óptica da permeabilidade da membrana de Candida albicans para Clorina (PDZ)
NIRO, C. M.; CAFACE, R. A.; GUIMARÃES, F. E. G. 74

IC39 - Efeito da mistura de íons alcalinos e alcalinos terrosos em vidros fosfatos
NOBRE, D. A.; SCHNEIDER, J. F. 76

IC40 - Processamento de dados para análise biomecânica com sensor inercial em pacientes com Acidente Vascular Encefálico (AVE): inovação tecnológica para pessoas com disfunção física
OLIVEIRA, L. O. de; CASARIN, R. L.; PAOLILLO, F. R.; CASTRO NETO, J. C. de 78

IC41 - Otimização em objetos 3D para jogos educativos
OLIVEIRA, D. D. de; FERNANDES, A. A. C.; LIMA, J. F. R.; GUIDO, R. V. C. 79

IC42 - Caracterização de complexos proteína-proteína e proteína-tRNA
PEREIRA, M. L.; SILVA, M. T. A. da; THIEMANN, O. H. 80

IC43 - Aprendizado de técnicas de simulação computacional em física de semicondutores
PEREIRA, R. D.; SIPAHI, G. M. 81

IC44 - Precession: um software para criar experimentos simulados de ressonância magnética
PESSOA, V. H. de M.; PIZETTA, D. C.; PAIVA, F. F. 82

IC45 - Investigando as concepções conceituais em física dos alunos de graduação do campus de São Carlos da USP
QUIBAO, M. P.; ALMEIDA, N. S. de; NAZARIO, N. R.; SILVA, A. C.; SILVA, R. M. A. A.; MUNIZ, S. R.; PAIVA, F. F. 83

IC46 - Desenvolvimento e caracterização de nanocápsulas de protoporfirina IX para aplicação em nanomedicina associada à terapia fotodinâmica
REYES, G. M.; BERNARDI, J. C. 85

IC47 - Fluorescência dos produtos finais de glicação avançada (AGEs) em pacientes com Acidente Vascular Encefálico (AVE)
RIBEIRO, O. R.; PAOLILLO, F. R.; BAGNATO, V. S.; CASTRO NETO, J. C. de 86

IC48 - Estudos estruturais do complexo SEPT 6G-2G
ROSA, H. V. D.; ARAÚJO, A. P. U. de 87

IC49 - Desenvolvimento de um sistema de estabilização de lasers pelo método Pound-Drever-Hall
SANTOS, B. N.; HENN, E. A. de L. 88

IC50 - Síntese e eletrocristalização de nanotubos de dióxido de titânio
SANTOS, L. F. L. S.; GONÇALVES, R. V.; M'PEKO, J. C. 89

IC51 - Caracterização de madeiras modificadas com extratos de pimentas como preservantes naturais
SANTOS, M. H.; GONÇALVES, D. 90

IC52 - Avaliação e caracterização de misturas de fotossensibilizadores para otimização de tratamentos de terapia fotodinâmica.
SANTOS, N. F.; ROMANO, R. A.; PRATAVIEIRA, S.; BAGNATO, V. S. 92

IC53 - Caracterização de novos moduladores de microtúbulos com propriedades anticâncer
SILVA, E. M. G.; MARTINS, C. T.; MAGALHÃES, L. G.; RUSSOWSKY, D.; ANDRICOPULO, A. D. 93

IC54 - Síntese e caracterização de materiais semicondutores nanoestruturados luminescentes à base de CaAl2O4
SILVA, G. M. R. da; MESQUITA, A. 95

IC55 - Aprimoramento de um ambiente integrado de desenvolvimento e de um framework para ressonância magnética
SILVA, L. de C. R. da; PIZETTA, D. C. 96

IC56 - Construção de um microscópio confocal para estudo de centros NV em diamante e pinças ópticas - explorando novas tecnologias quânticas
SILVA, P. F.; SEGURA, C. O. O.; MUNIZ, S. R. 97

IC57 - Desenvolvimento de uma fonte versátil de radiofrequência e micro-ondas
SILVA, R. A. de S.; SEGURA, C. O. O.; MUNIZ, S. R. 98

IC58 - Novas estratégias para inativação fotodinâmica de Staphylococcus aureus em sangue
SOARES, J. M.; BLANCO, K. C. 100

IC59 - Avaliação da influência dos parâmetros utilizados na Transformada de Laplace nas distribuições de T2 obtidas
SOLCIA, G.; MONTRAZI, E. T.; CARDOSO, C.; PAIVA, F. F. 101

IC60 - Modelo "Bang-Bang"para a dinâmica dissipativa de sistemas quânticos simples
SOUSA, G. de; BRITO, F. B. de 102

IC61 - Desenvolvimento de padrões de referência para sistemas ópticos em biofotônica
SOUZA, G. de; ROMANO, R. A.; MORIYAMA, L. T.; KURACHI, C. 103

IC62 - Descoberta de derivados 4-quinolinonas como candidatos a composto líder para o desenvolvimento de novos antimaláricos
SOUZA, J. O. de; AGUIAR, A. C. C. A.; ALMEIDA, S. M.; CORREA, A. G.; GUIDO, R. V. C. 104

IC63 - Influência da radiação ultravioleta no envelhecimento do cristalino humano e na formação da catarata relacionada à idade
SOUZA, R. F. S. de; CASTRO NETO, J. C. de; MATOS, L. de; NEVES, N. I. de S. 106

IC64 - Estudo de moléculas orgânicas (perilenos) para aplicações em meios ativos de lasers: aplicação em lasers aleatórios
SOUZA, W. F. de; DE BONI, L. 107

IC65 - Desenvolvimento e implementação de um método de processamento de imagens de Ressonância Magnética para avaliação de cirrose e função hepática
TONIN, Y. R.; PAIVA, F. F. 108

IC66 - Diálogos em um espaço de educação não formal
VIZOTTO, M. E.; CAMARGO, I. L. B. C.; SANTOS, G. C. 109

IC67 - Análise em campo do espectro infravermelho da clorofila em um ambiente de diversidade de espécies e clima
VIZIOLI, H. T.; CASTRO NETO, J. C. de 110

IC68 - Espalhamento de primeira hiperpolarizabilidade em polímeros orgânicos quirais
WESTIN, R. G.; DE BONI, L. 112

IC69 - Descoberta de novos compostos híbridos de Artesunato e Artemisinina como novos candidatos para o desenvolvimento de antimaláricos
ZANINI, C. L.; PANCIERA, M.; SANTOS, E. F. S.; OLIVA, G.; CORREIA, C. R. D.; GUIDO, R. V. C.; AGUIAR, A. C. C. A. 113

IC70 - Nanopartículas luminescentes de SiO2 dopadas com terras raras
ZAVAN, R. A.; CAMARGO, A. S. S. de 115

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Cladding waveguide in L-threonine crystals inscribed by femtosecond laser
ALMEIDA, G. F. B.; MARTINS, R. J.; SIQUEIRA, J. P.; ALMEIDA, J. M. P. de; RODRIGUES JUNIOR, J. J.; MEDONÇA, C. R. 116

PG2 - Porque os estômatos de folhas de plantas com superfície abaxial roxa são verdes? Uma pergunta baseada em evidências experimentais específicas.
ALMEIDA FILHO, H. A. de.; BRUNO, O. M. 118

PG3 - Estudo do recobrimento biológico de nanossuperfícies por modelagem computacional: aplicação no desenvolvimento de imunonanossensores
AMARANTE, A. M.; IERICH, J. C. M.; MORAES, A. de S.; SOUZA, D. G. B.; FRANCA, E. de F.; FREITAS, L. C. G.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de; LEITE, F. de L. 120

PG4 - Estudo de propriedades elétricas das estruturas de células solares
AMORIM, D. R. B.; FARIA, R. M. 122

PG5 - Supercondutores holográficos multi-componentes
APRILE, N. P. ; HARTMANN, B. 123

PG6 - Análises dinâmicas e modelagem de osciladores biológicos
ARAUJO, G. D.; MAIA, L. P. 124

PG7 - Fabricação e estudos elétricos de células fotovoltaicas orgânicas
ARAUJO, F. L. de; FARIA, R. M. 126

PG8 - Estudos das relações entre estrutura e função de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios: em busca de enzimas mais eficientes na depolimerização de biomassa lignocelulósica
ARAÚJO, E. A. de ; MANZINE, L. R. ; PIIADOV, V. ; URIU, M. B. ; POLIKARPOV, I. 128

PG9 - Propriedades eletrônicas da cadeia de Fibonacci
ARAÚJO, R. do N.; ANDRADE, E. de C. e 130

PG10 - Cherenkov light production in extensive air showers and hadronic interaction models at CTA energies
ARBELETCHE, L. ; SOUZA, V. de 131

PG11 - Purificação e caracterização de biossurfactante produzido por linhagem termofílica de Bacillus isolada de amostra rochosa de reservatório de petróleo
ARGENTIN, M. N.; BOSSOLAN, N. R. S. 133

PG12 - Estudo da angiogênese pós-terapia fotodinâmica em modelo de membrana corioalantoica
ARTHUZO, G.; BUZZÁ, H. H.; BAGNATO, V. S. 135

PG13 - An unified treatment for shock waves and immersed bodies in fluids
AURICHIO, V. H.; CUCCHIERI, A.; DEOLIVEIRA, M. L. B. 137

PG14 - Estudos estruturais e funcionais da enzima MnaA de Staphylococcus aureus
AZEVEDO, É. C. de; NASCIMENTO, A. S. 138

PG15 - Retratando o perfil motivacional de alunos de cursos de física
BADAN, L. da C.; ALMEIDA, N. S. de; QUIBAO, M. P.; NAZARIO, N. R.; SILVA, A. C.; SILVA, R. M. A. A.; MUNIZ, S. R.; PAIVA, F. F. 140

PG16 - Otimização de modularidade baseada em caminhadas auto-excludentes
BAGNATO, G. de G.; RONQUI, J. R. F.; TRAVIESO, G. 142

PG17 - Mixed State Metrology with Non-Hermitian Hamiltonians
BARRETO, D. L. ; SOARES-PINTO, D. de O. 143

PG18 - Theoretical study of transition metal dichalcogenides: stability energy, structural and electronic properties
BASTOS, C. M. de O.; SABINO, F. P.; BESSE, R.; SIPAHI, G. M.; SILVA, J. L. F. da 144

PG19 - Abordagem histórico-investigativa: limites e contribuições em aulas de física
BATISTA, R. da F. M.; SILVA, C. C. 145

PG20 - Free-living amoebae occurrence in freshwater samples of São Carlos, São Paulo, Brazil
BELLINI, N. K.; FONSECA, A. L. M. da; THIEMANN, O. H. 147

PG21 - Algoritmo de reconhecimento de padrões em eventos do observatório Pierre Auger
BENATTI, A. ; SOUZA, L. V. de 149

PG22 - Relative stability of octahedral and trigonal prismatic phases of MoSe2 flakes from density functional theory calculations
BESSE, R.; CATURELLO, N. A. M. S.; BASTOS, C. M. de O.; GUEDES-SOBRINHO, D.; LIMA, M. P.; SIPAHI, G. M.; SILVA, J. L. F. da 150

PG23 - Clock generator subsystem for MRI
DE BITTENCOURT, H. P. ; VIDOTO, E. L. G. ; TANNÚS, A. 152

PG24 - Study of Majorana leakage on quantum dots
BIRAL, E. J. P.; EGUES, J. C.; CRUZ, A. R.; PENTEADO, P. H.; VERNEK, E. 153

PG25 - Estudo do envolvimento da RNA helicase Sub2 na reação de *splicing* em *Trypanosoma brucei*
BORALLI, C. M. S.; DA SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H. 154

PG26 - Estudos de relações entre estrutura e função de Xilose Isomerase
BRIGANTI, L. E. R. P. P. L. D. B. ; POLIKARPOV, I. 156

PG27 - Análise da interação da septina 9 humana com modelos miméticos de membrana
BROGNARA, G.; ARAÚJO, A. P. U. de 158

PG28 - Análise e melhoria de um sistema de aquisição de pressão intracraniana não invasiva wireless
BRUNELLI, R. ; ANDRADE, R. de A. P. ; MASCARENHAS, S. 160

PG29 - Inativação fotodinâmica pela incorporação de curcumina induzida em microorganismos para melhorar a descontaminação microbiana
CAFACE, R. A.; GUIMARÃES, F. E. G. 161

PG30 - Investigation of PDT effects on 3D model of breast cancer
CAMPOS, C. de P. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. 163

PG31 - Implementação de protocolos de imagens por ressonância magnética para estudos morfológicos de meios porosos
CARDOSO, C.; FOERSTER, B. U.; OLIVEIRA, E. L.; FORTULAN, C. A.; BONAGAMBA, T. J.; PAIVA, F. F. 164

PG32 - Discretização de erros na fixação do gauge de Landau na rede: uma generalização
CARVALHO, L. F.; CUCCHIERI, A.; MENDES, T. C. R. 166

PG33 - A universal platform for fabricating organic electrochemical devices
CAVASSIN, P. ; FARIA, G. C. 167

PG34 - Peptídeo beta-amiloide da doença de Alzheimer e sua interação com peptídeos D-enantioméricos estudados por Ressonância Magnética Nuclear
CAVINI, Í. A. ; MUNTE, C. E. ; WILLBOLD, D. ; GARRATT, R. C. ; KALBITZER, H. R. 168

PG35 - Simulações ambientais e caracterização espectroscópica in situ de potenciais bioassinaturas moleculares para aplicação em missões espaciais
CERINI, M. F.; GALANTE, D. ; RODRIGUES, F. 170

PG36 - A descarga elétrica de um gimnotiforme pulsador: mapeamento espaço temporal de um "chirp"
CESARINO, V.; PINTO, R. D. 172

PG37 - Klein tunneling in heterstructures of Weyl semimetals
COSTA, J. V. I.; CÂNDIDO, D. R.; EGUES, J. C. 174

PG38 - Investigation of photophysical properties on Pt-complexes porphyrins
COCCA, L. H. Z.; GOTARDO, F.; DE BONI, L.; IGLESIAS, B. A.; DIAS, R. 175

PG39 - Influência da espécie iônica na característica elétrica de semicondutores mistos orgânicos
COLUCCI, R. ; FARIA, G. C. 177

PG40 - Black holes in scalar-tensor theory
CONSOLE, F.; HARTMANN, B. 178

PG41 - Biosensors based on immobilized folic acid molecules for cancer cells detection
CORREIA, A. R.; VIEIRA, N. C. S.; ZUCOLOTTO, V. 179

PG42 - Biossurfactantes produzidos por linhagens bacterianas isoladas de reservatório de petróleo: produção e avaliação das propriedades tensoativas.
COSTA, G. C.; BOSSOLAN, N. R. S. 180

PG43 - Livertool: an open-source tool for liver fat fraction estimation with magnetic resonance images
COSTA, Y. A. da ; FLORES, G. A.; RODRIGUES, E. L. L. ; PAIVA, F. F. 182

PG44 - Caracterização de hematita - Serra do Espinhaço (Minas Gerais).
CRUZ, C. G. C.; ANDRADE, M. B. de 183

PG45 - Study of the long term in-field degradation of Polydimethylsiloxane (PDMS) based high-voltage insulators via low-field nuclear magnetic resonance
CUBGA, G.; DEAZEVEDO, E. R.; MURANO, M.; MURANO A.; AKCELRUD, L.; MOLINARI, J... 184

PG46 - Desenvolvimento de um microscópio óptico holográfico sem lentes
D'ALMEIDA, C. de P. ; MORIYAMA, L. T. ; PRATAVIEIRA, S. 186

PG47 - Electron paramagnetic resonance study of vanadium-doped antimony-germanate glasses
DANCIÃES, I.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; MONTESSO, M.; MANZANI, D.; NALIN, M. 188

PG48 - Novas formas sólidas multicomponentes do fármaco antituberculose (S,S)-etambutol com higroscopicidade reduzida
DINIZ, L. F.; CARVALHO JUNIOR, P. de S.; MELO, C. C. de ; ELLENA, J. A. 189

PG49 - Quantum effects in the cooperative scattering of light by ultracold dilute atomic clouds
ESPIRITO SANTO, T. S. do; BACHELARD, R. P. M. 191

PG50 - Biochemical and biophysical characterization of novel GH10 xylanase prospected from a sugar cane bagasse compost-derived microbial consortia
EVANGELISTA, D. E.; KADOWAKI, M. A. S.; MELLO, B. L.; POLIKARPOV, I. 192

PG51 - Desenvolvimento de técnica combinando fotobiomodulação e radioterapia para otimização da resposta tumoral à radiação ionizante
FARIA, C. M. G. de; INADA, N. M.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S. 193

PG52 - Termometria ótica baseada em vidros fluorofosfato dopados com Nd3+
FARIA, W.; CAMARGO, A. S. S. de 194

PG53 - Análise estrutural e funcional das enzimas Fosfopentomutase e Ribose-fosfato Pirofosfoquinase de Schistosoma mansoni
FERNANDES, A.; SCORTECCI, J. F.; SERRÃO, V. H. B.; MUNIZ, J. R. C.; PEREIRA, H. 196

PG54 - Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores multi-core
FERREIRA, F. ; TRAVIESO, G. ; RUGGIERO, C. A. 197

PG55 - Ambientes radioativos naturais como fontes de desequilíbrio químico local e suas potenciais implicações prebióticas
FERREIRA, T. A. ; GALANTE, D. 199

PG56 - Complex networks computational modeling of visual attention.
FERREIRA, S. J. V.; COSTA, L. da F. 201

PG57 - Preliminary structural analysis of dna wrapping in bacterial transcription initiation complex by transmission electron microscopy
FLOREZ ARIZA, A. J.; CASSAGO, A.; GUERRA GIRALDEZ, D.; PORTUGAL, R. V. 202

PG58 - Structural and functional studies of cellulosomal thermophilic glycoside hydrolases involved on lignocellulosic biomass hydrolysis
ALMEIDA, L. R. de; SILVA, W. J. G. da; MUNIZ, J. R. C. 204

PG59 - Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente
FORTUNATO, T. C.; MORIYAMA, L. T. 205

PG60 - Perovskitas condutoras de prótons dos sistemas não estequiométricos Ba3Ca1,18Nb1,52R0,3O9 (R = Y, Nd, Sm, Gd): preparação e propriedade
FRANCISCO, L. H. ; RODRIGUES, J. E. F. S. ; HERNANDES, A. C. 206

PG61 - Spatial dynamics of ecosystem engineers: a coupled map lattice approach
FRANCO, C. ; FONTANARI, J. F. 208

PG62 - Expansão anômala observada em condensado de Bose-Einstein fora do equilibrio
GARCÍA, A.; FRITSCH, A.; TELLES, G. D.; BAGNATO, V. S. 209

PG63 - Correlation functions on random spin-1/2 chains: from scaling relations to nonlocality
GETELINA, J. C. ; HOYOS, J. A. 210

PG64 - Análise da aplicabilidade de modelos neuronais na simulação de redes neuronais artificiais
GEWERS, F. L.; COSTA, L. da F. 211

PG65 - Perfil do índice de refração não linear do "Gorilla Glass"
GOMES, J. A. C.; BARBANO, E. C.; ZÍLIO, S. C.; MISOGUTI, L. 212

PG66 - Characterization of nonlinear optical properties of chalcones derivatives and schiff-base molecules
GOTARDO, F.; COCCA, L. H. Z.; FONSECA, R. D.; OLIVEIRA, G. D. C.; PEREZA, C. N.; CUSTODIO, J. M. F.; NAPOLITANO, H. B.; ROMUALDO, L. L.; MESQUITA, G. M.; DE BONI, L. 213

PG67 - Desenvolvimento de um sistema portátil de detecção de linfonodo sentinela.
GOVONE, A. B.; BEVILAQUA, J. L. B.; BARROS, A.; PINCERATO, K.; COS, P. A.; BAGNATO, V. S.; RAMOS, M. L.; KURACHI, C.; ROSA, R. G. T.; CASTRO NETO, J. C. de 215

PG68 - Crystallographic studies of ElrR, a transcriptional regulator of ElrA, a virulence factor of Enterococcus faecalis, and indications of it interaction with DNA fragment.
DE GROOTE, M. C. R.; CAMARGO, I. L. B. C.; HORJALES, E.; REPOILA, I.; SERROR, P. 216

PG69 - Correlation effects in the emergence of Bound State in the Continuum
GUESSI, L. H.; SERIDONIO, A. C.; OLIVEIRA, L. N. de 218

PG70 - Optical nonlinearities in microstructures produced by two-photon polymerization
HENRIQUE, F. R. ; MENDONÇA, C. R. 220

PG71 - Conversão de 5-hidroximetilfurfural por enzimas oxidativas de fungo
HIGASI, P.; KADOWAKI, M. A. S.; POLIKARPOV, I. 221

PG72 - Misturas de gases ultrafrios diluídos
HUAMANI CHAVIGURI, J. R.; BAGNATO, V. S.; CARACANHAS, M. A. 223

PG73 - Development of low-cost biosensors for cancer biomarkers detection
IBÁÑEZ-REDIN, G. G.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de; GONÇALVES, D. 224

PG74 - Fundamentos matemáticos das fases geométricas
ISRAEL, I. ; MAIA, L. P. 225

PG75 - Photo-oxidation of bacterial lipid monolayers interacting with methylene blue and curcumin
JOCHELAVICIUS, K. ; NOBRE, T. M. ; AOKI, P. H. B. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de 226

PG76 - Nebulização como ferramenta de entrega do fotossensibilizador na inativação fotodinâmica aplicada às doenças respiratórias
KASSAB, G.; GERALDE, M. C.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S. 228

PG77 - Descoberta e desenvolvimento de um ativo cosmético para controle da oleosidade
KATEKAWA, E.; GUIDO, R. V. C. 229

PG78 - LIBS em solos: quantificação elementar e estudo da influência do comprimento de onda
KRÜGER, A. L.; NICOLODELLI, G.; MILORI, D. M. B. P. 230

PG79 - Estudo com espectroscopia de fluorescência induzida por laser e imagens de fluorescência no diagnóstico de doenças de soja
KUBOTA, T. M. K.; MAGALHÃES, A. B.; VILLAS-BOAS, P. R.; MILORI, D. M. B. P. 232

PG80 - Introdução à QCD na rede
LACHINI, N.; MENDES, T. C. R. 234

PG81 - New physics in astroparticle physics
LANG, R. G. ; SOUZA, V. de 235

PG82 - Evaluation of photodynamic therapy using redox-responsive nanoparticles carrying PpIX
LEITE, I. S.; VIVERO-ESCOTO, J. L.; LYLES, Z.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M. 236

PG83 - Novo empacotamento nos coiled-coil das septinas do grupo III e a sua relação com a polimerização de filamentos em redes
LEONARDO, D. A. ; NASCIMENTO, A. F. ; VALADARES, N. F. ; USON, I. ; GARRATT, R. C. . 238

PG84 - Estudo funcional e estrutural das proteínas spliceossomais U5-15K e U5-102K de Trypanosoma brucei
LIMA, A. L. de; SILVA, M. T. A. da; THIEMANN, O. H. 240

PG85 - Control of non-Markovianity by the dissipation of a qubit
LIMA, R. B. B.; SOARES-PINTO, D. de O.; BRITO, F. B. de; DEAZEVEDO, E. R.; FILGUEIRAS, J. 242

PG86 - Optoelectronic properties of an organic light harvesting capacitor
LIMA FILHO, J. B. de ; MIRANDA, P. B. 243

PG87 - Investigating the Endocytosis of gold nanorods and natural nanocarriers
LINS, P.; CANCINO-BERNARDI, J.; ZUCOLOTTO, V. 244

PG88 - Modelo modificado de Skyrme
LIVRAMENTO, L. R. ; FERREIRA, L. A. 245

PG89 - Descrição cristaloquímica e mineralógica de minerais do grupo da romeíta
LOPES, G. A. de C.; ANDRADE, M. B. de; ATENCIO, D.; ELLENA, J. A. 246

PG90 - Medição da razão 2H/1H de fluxo em raios cósmicos com o experimento AMS-02.
LORDELLO, V. D. ; VECCHI, M. 248

PG91 - A non-linear approach for pattern recognition in networks
MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. 249

PG92 - Planejamento de novos moduladores da proteína tubulina com propriedades antitumorais in vitro
MAGALHÃES, L. G. ; FONSECA, M. B. da ; GRAEBIN, C. S. ; ANDRICOPULO, A. D. 250

PG93 - A study of the thermodynamic properties of quantum systems
MALAVAZI, A. H. A.; BRITO, F. B. de 252

PG94 - Absorção de dois fótons degenerados em compostos da família das bi-calconas
MANOEL, D. da S.; MENDONÇA, C. R.; DE BONI, L.; GONÇALVES, P. J. 253

PG95 - Implementação de sequências rápidas de imagem por Ressonância Magnética
MARASSI, A. G.; GOMES JUNIOR, F. G.; TANNÚS, A. 254

PG96 - Design, desenvolvimento e testes de RPCs para o Observatório Pierre Auger
MARTINS, V. B.; DE SOUZA, V.; DOBRIGKEIT, C.; LOPES, L.; ASSIS, P.; FERREIRA, M.; LUZ, R.; PIMENTA, M.; CONCEIÇÃO, R. 255

PG97 - Quantum Maxwell demon using superconducting devices in non-thermal baths
MARTINS, G. F.; BRITO, F. B. de 256

PG98 - Amplificação de sinal de fluorescência utilizando nanoestruturas formadas com laser femtossegundo: utilização para Protoporfirina IX
MATTOS, V. S.; SOUZA, M. A. A. de; YASUOKA, F. M. M.; GUIMARÃES, F. E. G.; PAOLILLO, F. R.; CASTRO NETO, J. C. de 258

PG99 - Encapsulamento de oligonucleotídeos de DNA em nanopartículas de quitosana
MELO, C. C.; ZUCOLOTTO, V.; BERNARDI, J. C. 260

PG100 - Automontagem de filamentos de septinas estudada por microscopia eletrônica
MENDONÇA, D. C.; PORTUGAL, R. V.; CASSAGO, A.; ARAÚJO, A. P. U. de; MORAIS, S. T. do B.; GARRATT, R. C. 262

PG101 - Desenvolvimento e estudos de estrutura-atividade de inibidores da enzima Diadenilato Ciclase de Staphylococcus aureus
MENEGHELLO, R.; NAVARRO, M. V. de A. S. 263

PG102 - Desenvolvimento de filtros baseados em transformadas wavelet para espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear
MENEZES, L. P. ; PAIVA, F. F. 264

PG103 - Nucleação de uma rede de vórtices com um feixe de agitação num condensado de Bose-Einstein
MERCADO, E. G.; CASTILHO, P. C. M.; FARIAS, K.; BAGNATO, V. S. 265

PG104 - Atividades ópticas de DNA em presença de plasmons polaritons de superfície
MIRANDA, M. M. P.; MAREGA JÚNIOR, E. 266

PG105 - Measuring the influence of the laser pulse width on nonlinear refractive index of solvents measured
MIGUEZ, M. L.; MISOGUTI, L. 268

PG106 - Descelularização de traqueias utilizando equipamento multifuncional combinando técnicas da fotônica.
MION, W. M.; GUIMARÃES, F. E. G.; BAGNATO, V. S.; DEFFUNE, E. 270

PG107 - Redução de fase em osciladores de ciclo limite estocásticos
MONTEIRO, V. M. ; MAIA, L. P. 271

PG108 - Avaliação da acurácia do modelo de carbono em solos- CQESTR- em sistemas agrícolas Brasileiros
MORAES, R. R. D. de; VILLAS-BOAS, P. R. 272

PG109 - Produção e estudos estruturais de complexos de septinas
MORAIS, S. T. do B.; MENDONÇA, D. C.; ARAÚJO, A. P. U. de 274

PG110 - Time reversibility in quantum theory described in an operational framework
MORAZOTTI, N. A. da C. ; NAPOLITANO, R. de J. 276

PG111 - Fases parasistas na origem do momento magnetico nos filmes finos de BiFeO3 crescidos por baixa taxa de deposição RF sputtering.
MORI, T. J. A.; MOULS, C. L.; MORGADO, F. F.; SCHIO, P.; CEZAR, J. C. 278

PG112 - Exoproteoma, clonagem, expressão e caracterização heteróloga de enzimas termofílicas do fungo Thielavia terrestris com aplicação biotecnológica
MULINARI, E. J.; SEGATO, F.; PRADE, R. A.; MUNIZ, J. R. C. 279

PG113 - Estudos bioquímicos e estruturais de duas carboxilesterases de Bacillus licheniformis
NAKAMURA, A. M.; GODOY, A. S.; KADOWAKI, M. A. S.; NASCIMENTO, A. S.; POLIKARPOV, I. 281

PG114 - A matematização da eletrostática no século XVIII: um estudo histórico-crítico
NARDI, L. M. C. ; SILVA, C. C. 283

PG115 - Dynamics of a j=3/2 quantum spin liquid
NATORI, W. M. H. ; DAGHOFER, M.; PEREIRA, R. G. 285

PG116 - Teoria de laser de estados não coerentes
OLIVEIRA NETO, F. de; MOUSSA, M. H. Y. 286

PG117 - Monte Carlo recursivo para o cálculo de energia livre de ligação em sistemas biológicos
NOGUEIRA, V. H. R.; NASCIMENTO, A. S. 287

PG118 - Aproximantes de Padé e a Série Perturbativa da QCD nos decaimentos do Tau em Hádrons.
OLIANI, F. H.; BOITO, D. R. 289

PG119 - Estudos estruturais e caracterização por fragmentos na descoberta de novos agroquímicos
OLIVEIRA, A. A.; GUIDO, R. V. C.; OLIVA, G.; BUENO, R. V.; LIMA, G. M. A.; MALUF, F. V. .. 290

PG120 - Desenvolvimento de ferramenta computacional para obtenção automatizada de dados em testes comportamentais do tipo campo aberto
OLIVEIRA, I. M.; PAIVA, F. F..... 292

PG121 - Photonic decontamination of circulating fluids
OLIVEIRA, B. P. de; BLANCO, K. C.; BAGNATO, V. S. 293

PG122 - Estrutura Cristalográfica da proteína NS5 do Zika Virus domínio RNA polimerase dependente de RNA
OLIVEIRA, K. I. Z. de; GODOY, A. S.; LIMA, G. M. A.; TORRES, N. U.; MALUF, F. V.; GUIDO, R. V. C.; OLIVA, G. 294

PG123 - A new computational approach to investigate digital porous media by NMR
OLIVEIRA, E. L.; FERREIRA, A. G. A.; TREVIZAN, W.; BONAGAMBA, T. J. 296

PG124 - Combined cellulose and quaternized chitosan films for tissue engineering
ONO, B. A.; JOHNS, M. A.; COURTENAY, J. C.; SANTOS, D. M.; BUKZEM, A. de L.; CAMAPANA FILHO, S. P.; GUIMARÃES, F. E. G.; RAM, S.; SCOTT, J. L. 297

PG125 - Estudos no diamante para aplicações em tecnologias quânticas
ONCEBAY, C.; ALMEIDA, J. M. P. de; MENDONÇA, C. R.; ACOSTA, V.; MUNIZ, S. R..... 299

PG126 - Informação quântica e relatividade
OTA, I. N. N. ; VANZELLA, D. A. T. 300

PG127 - Molecular dynamics simulation and FEP+ calculations for a series of solchicine binding site modulators of tubulin
PALOMINO-SALCEDO, D. L. ; MAGALHÃES, L. G. ; ANDRICOPULO, A. D. 301

PG128 - Production and trapping of $\nu = 0$ ultracold molecules by a high- power light beam
PASSAGEM, H. F. ; MARCASSA, L. G. 302

PG129 - Estudo da dinâmica, interação e internalização do fotossensibilizador Curcumina em cultura planctônica das bactérias pré – induzido por luz.
PINTO JUNIOR, F. F.; GUIMARÃES, F. E. G..... 303

PG130 - PyMR : um framework para programação de sistemas de ressonância magnética
PIZETTA, D. C. ; SILVA, L. de C. R. da ; SOUZA, P. V. B. D. de ; FALVO, M. ; COELHO, F. B. ; VIDOTO, E. L. G. ; MARTINS, M. ; TANNÚS, A. 305

PG131 - Identificação de minerais por processamento computacional
QUEIROZ, A. A. A. E. de ; ANDRADE, M. B. de 306

PG132 - A comparison between Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and Flame Atomic Absorption Spectrometry (FAAS) data of soybean leaves: an evaluation of LIBS measures quality for future quantitative and diagnostic analysis
RANULFI, A. C.; SENESI, G. S.; WATANABE, A.; CAETANO, J.; MEYER, M.; MILORI, D. M. B. P. 307

PG133 - Modelos análogos: o despertar do vácuo.
RIBEIRO, C. C. H. ; VANZELLA, D. A. T. 309

PG134 - Multi-target nanocarrier design to the sustained release of paclitaxel targeting transferrin receptor and the metastatic factor S100A9
RIBOVSKI, L. ; CANCINO-BERNARDI, J. ; ZUCOLOTTO, V. 310

PG135 - Avaliação de um sistema portátil de tempo de vida de fluorescência para diagnóstico precoce de câncer de colo de útero
ROMANO, R. A.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI. C.; GUIMARÃES, F. E. G. 312

PG136 - Análise de redes de interação de proteínas através da correlação entre suas medidas de centralidade.
RONQUI, J. R. F.; TRAVIESO, G. 313

PG137 - Development of a fluorescence lifetime imaging microscope for clinical applications
ROSA, R. G. T.; JO, J.; KURACHI, C. 314

PG138 - Simulação de potenciais moleculares em íons armadilhados
ROSSETTI, R. F. ; MOUSSA, M. H. Y. 315

PG139 - Bosons in optical lattices
SANTANA, F. T. ; SANTOS, F. E.; TUK, A. P. 317

PG140 - Fabrication Poly(p-phenylenevinylene) (PPV)-doped 3D microstructures by fs-laser direct writing via two-photon polymerization (2PP)
SALAS, O. I. A.; TOMAZIO, N. B.; OTUKA, A. J. G.; ANDRADE, M. B. de; BALOGH, D. T.; MENDONÇA, C. R. 318

PG141 - Characterization of Odorant-binding proteins of Rhodnius prolixus
SAMPAIO, R. P.; THIEMANN, O. H. 319

PG142 - Characterization of components of Naegleria gruberi's selenocysteine biosynthesis and insertion pathways: selenophosphate synthetase and tRNAsec
SANTOS, T.; THIEMANN, O. H. 320

PG143 - Low-dimensional description on globally coupled oscillators
SANTOS, E. R. dos ; SILVA, T. P. da 321

PG144 - Análise de imagens de fluorescência no diagnóstico de doenças de soja: ferrugem asiática e haste verde e retenção foliar
SBRISSA NETO, D. A. ; PEREIRA, D. M. B. 323

PG145 - Complex networks on the modelling and characterization of multispectral images
SCABINI, L. F. S.; BRUNO, O. M. 325

PG146 - Estudo da via de incorporação de selenocisteínas: compreensão dos mecanismos de interações macromoleculares
SCORTECCI, J. F.; SERRÃO, V. H. B.; FERNANDES, A. de F.; BASSO, L. G. M.; OLIVEIRA NETO, M. de; THIEMANN, O. H. 327

PG147 - Desenvolvimento de nanopartículas poliméricas de poli (D,L – lactídeo – co – glicolídeo) (PLGA) para entrega controlada de ácido aminolevulínico (ALA)
SILVA, G. R. da; SANTOS, A. L. ; SANCHES, E. A. ; MASCARENHAS, Y. P. ; INADA, N. M. 329

PG148 - Signaling regulation studies of diguanylate cyclases PA0847 and PA3343 from Pseudomonas aeruginosa
SILVA, E. E. D. ; NAVARRO, M. V. de A. S. 331

PG149 - Protein conformational ensemble analyses based on differential geometry and information theory
SILVA NETO, A. M. da; OLIVA, G.; MONTALVÃO, R. W. 333

PG150 - LLC-KBDM: an unsupervised machine learning approach for MRS data fitting
SILVA, D. M. D. D. da; PAIVA, F. F. 334

PG151 - πFlowMR: um protótipo dataflow inspirado na Máquina Dataflow de Manchester
SILVA JUNIOR, J. T. da; MATIAS, P.; MARTINS, M. J.; RUGGIERO, C. A. 336

PG152 - Dynamics of epidemics with awareness in multiplex networks
SILVA, P. C. V. da ; RODRIGUES, F. A. 338

PG153 - Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos em regime turbulento
SMAIRA, A. de F.; TELLES, G. D.; BAGNATO, V. S. 340

PG154 - Efeitos coletivos nos processos de interação radiação-matéria: superátomos, superradiância e superabsorção
SOARES, P. M. S. B.; MOUSSA, M. H. Y. 341

PG155 - Organic MIS and EIS devices based on Spin-coated P3HT-PVP-CMC films for glucose sensing.
SOUSA, M. A. M. ; RAYMUNDO-PEREIRA, P. A. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de 343

PG156 - Análise do potencial de força média (PMF) para o ajuste induzido da Endoglucanase de Bacillus licheniformis.
SOUSA, S. C.; NASCIMENTO, A. S. 344

PG157 - Desenvolvimento de emulador do espectrômetro digital do CIERMag
SOUZA, P. V. B. D. de; VIDOTO, E. L. G.; MARTINS, M. J.; TANNÚS, A. 345

PG158 - Advantage of using nonlinear ellipse rotation effect to determine orientational nonlinearities: observation of an 2.25 enhancement factor
SOUZA, T. G. B. de; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. 346

PG159 - Estudos de modelagem molecular aplicados ao planejamento de candidatos a novos fármacos antichagásicos
SOUZA, A. S. de ; OLIVEIRA, M. T. ; ANDRICOPULO, A. D. 347

PG160 - Screening of the open source Malaria Box reveals new inhibitors of Plasmodium falciparum enolase as early lead compounds
SOUZA, G. E. ; AGUIAR, A. C. C. A.; SOUZA, L. R. F. de ; MALUF, F. V. ; GARCIA, C. R. ; OLIVA, G. ; GUIDO, R. V. C. 349

PG161 - Aspectos supramoleculares em dois sais 1:1 de 5-Fluorocitosina com os ácidos inorgânicos Bromídrico e Metanossulfônico
SOUZA, M. da S.; SILVA, C. C. P. da; ALMEIDA, L. R. de; DINIZ, L. F. 351

PG162 - A high throughput, inexpensive and open-source biorreactor for optimization of recombinant protein expression.
STELMASTCHUK, L. B. F.; THIEMANN, O. H. 353

PG163 - Aplicações de Ressonância Magnética Nuclear ao estudo de meios porosos utilizando técnicas de polarização nuclear dinâmica
SÁ, A. A. de C.; BONAGAMBA, T. J. 354

PG164 - Radial heterostructured GaAs/AlGaAs nanowires
TAVARES, B.; TITO, M. A.; ARAKAKI, H.; SOUZA, C. A.; PUSEP, Y. A. 356

PG165 - Geração de estados quânticos via engenharia dissipativa
TEIZEN, V. F.; ROSSETTI, R. F.; ARAUJO, H. S.; OLIVEIRA NETO, F. de; MORAES NETO, G. D. de; MONTENEGRO, V.; VERNEK, E.; MOUSSA, M. H. Y. 357

PG166 - Gravitational wave emission from black holes pierced by cosmic strings
TEODORO, M. do C. ; HARTMANN, B. 359

PG167 - Determination of mobility edge in presence of metal-to-insulator transition
TITO, M. A.; POUSSEP, I. 360

PG168 - Boson stars in scalar-tensor gravity
TOMA, C. ; HARTMANN, B. 361

PG169 - Development of Hot Start Taq DNA polymerase alternatives for biotechnological applications
TORRES, N. U. ; COSTA, F. C. ; MUNIZ, A. B. ; MALUF, F. V. ; GUIDO, R. V. C. 362

PG170 - Caracterização de pulsos ultracurtos de femtossegundos
TUJERA, G. A. ; MENDONÇA, C. R. 364

PG171 - Computação quântica adiabática usando qubits supercondutores
VARGAS-GRAJALES, J. A.; BRITO, F. B. de 366

PG172 - Formulações de Quarks para a QCD na Rede
VISCARDI, L. A. M.; MENDES, T. C. R. 367

PG173 - Cálculo teórico da densidade eletrônica de sistemas periódicos tridimensionais
WANDERLEY, A. B.; ELLENA, J. A. 368

PG174 - Symmetries and boundary conditions in many-body systems
ZAWADZKI, K.; D'AMICO, I.; OLIVEIRA, L. N. de 369

IC1

Obtenção de nanoestruturas metálicas em substratos semicondutores por litografia por feixes de elétrons

AKAMATSU, D. Y.[1]; MAREGA JÚNIOR, E.[1]

daniel.akamatsu@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A principal meta deste trabalho é a obtenção de nanoestruturas metálicas em substratos semicondutores. As nanoestruturas são obtidas por processo de evaporação em substratos recobertos por uma máscara de PMMA produzida por litografia por feixe de elétrons. O processo de litografia por feixe de elétrons, e o o processo denominado FIB (focused ion beam), figuram entre os principais métodos para obtenção de nanoestruturas. (1) Foi obtida uma curva de calibração do processo de spin-coating (uma etapa importante do processo de litografia) ,em um intervalo de velocidades variando de 2000 a 4000 rpm, utilizando diferentes concentrações e pesos moleculares de PMMA. Também foi feita uma exposição de um filme de PMMA 996K-4% em GaAs (velocidade de 3000 rpm no processo de spin-coating) ao feixe de elétrons, a partir da qual observou-se ambos efeitos do espaçamento entre as linhas e do incremento da dose no processo de litografia. Doses altas e espaçamentos pequenos podem resultar em remoção excessiva do PMMA devido a espalhamento de elétrons quando colidem com as cadeias poliméricas. Foi possível concluir que massas moleculares e concentrações mais elevadas (996k-4%) são a melhor escolha para o processo, pois esta situação resultou na melhor cobertura do substrato, com espessura e uniformidade desejadas. Um espaçamento entre linhas de aproximadamente 3m e doses entre 0,5 e 1,0 são a melhor escolha para a produção de nanoestruturas.

Palavras-chave: Nanoestruturas. Litografia por feixe de elétrons. Spin-coating.

Referências:

1 BRATIFICH, R. **Fabricação e caracterização de nanoestruturas metálicas para aplicações em dispositivos plasmônicos**. 2015. 105 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

IC2

Avaliação das atribuições de causa para sucesso e fracasso escolar de alunos dos cursos de física

ALMEIDA, N. S. de[1]; HIROTA, L. da C. B.[1]; MUNIZ, S. R.[1]; PAIVA, F. F.[1]

nicoly.almeida@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

As ações dos indivíduos são moldadas por sua interpretação acerca dos sucessos e fracassos resultantes de experiências anteriores, o que afeta diretamente sua motivação. O processo de compreensão das razões para os próprios comportamentos do indivíduo, ou de outros, é definido como "atribuição causal". (1) O presente trabalho investigou as atribuições causais de alunos de Física para o sucesso e o fracasso escolar considerando diferentes situações de avaliação. Assim, é possível avaliar a perspectiva do aluno para atividades que dependem exclusivamente de si mesmo ou da interação com colegas. Foi utilizada a Escala Brasileira de Atribuição Causal para avaliar 4 dimensões causais (Lócus de Causalidade, Estabilidade e Controlabilidade Externa e Interna) atribuídas pelos alunos a situações de sucesso e fracasso em atividades avaliativas: provas, relatório e seminários. (2) Fizeram parte desta pesquisa 267 alunos (181 homens e 88 mulheres) dos diversos cursos de graduação (Bacharelados em Física, em Ciências Físicas e Biomoleculares, em Física Computacional e Licenciatura em Física) do Instituto de Física de São Carlos. Resultados: Os resultados obtidos para situações de sucesso e fracasso escolar não diferem estatisticamente uns dos outros. No contexto de provas, verificou-se que os alunos acreditam que seu desempenho depende prioritariamente dele e são altamente controláveis. Também revelam que o cenário tem leve tendência para a estabilidade assim como para o controle de outras pessoas. No que se refere aos relatórios, verificou-se que as causas são controláveis e estão altamente relacionadas a eles próprios. Além disso, apresentam tendência para a estabilidade e outras pessoas podem influenciar na situação. Já para os seminários, verificou-se que outras pessoas têm influência nesse cenário e que há tendência à estabilidade. As causas de seu desempenho estão altamente relacionadas a si próprio e que seu desempenho está, também, sob seu controle. Quando separados por curso, as diferenças notáveis são que os alunos de Ciências Física e Biomoleculares acreditam ter mais controle nas três situações que os alunos dos demais cursos, enquanto que aqueles da Física Computacional atribuem menor estabilidade para as causas evidenciadas.Os alunos avaliados apresentam padrão atribucional ajustado, o que minimiza o efeito negativo causado em seu perfil motivacional e consequente impacto no desempenho acadêmico.

Palavras-chave: Atribuição causal. Física.

Referências:

1 WEINER, B. Attribution theory, achievement motivation, and the educational process. **American Educational Research Association**, v.42, n.2,p. 203-215,1972.

2 PAIVA, M.; BORUCHOVITCH, E. Revisitando a teoria atribucional: compreendendo as relações interpessoais em sala de aula. **Itinerarius Reflectionis,** v.10, n.2,2014.doi:10.5216/rir.v10i2.31195

IC3

Non-Markovian processes in the two Bronwnian particle model

BARROS, I. de A.[1, 2]; BRITO, F. B. de[2]

igor.barros@usp.br

[1] Instituto de Química de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

In a general description of a physical system, it is important to keep in mind the presence of the surroundings and its effects on the system, given that none system in nature is totally isolated from its surroundings. In 1983, Caldeira and Leggett (1), concerning quantum systems, were able to describe a dissipative quantum dynamics through a model that describes the system's degree of freedom coupled bilinearlly to an infinite set of harmonic oscillators, that represent a thermal bath, using an ohmic phenomenological spectral function of this bath, recovering in the classical limit the Lagevin's dynamics. More recently, Duarte and Caldeira (2), extended the original model in the way that were able of dealing with more degrees of freedom, using a non-linear coupling between the degrees of freedom of the system and the harmonic oscillators, what resulted in a dissipative dynamics that generates an interaction between the degrees of freedom mediated by the bath. In the present work, it was considered a model of two Brownian particles that are coupled with a bath through a stochastic parameter, that maintains correlations in different realizations in time and in relation to the product of stochastic variables related to different degrees of freedom, which can be described in a phenomenological way. The model was solved using the Lagrangian formalism, which can be rewrite in the Hamiltonian formalism and be quantized and analyzed in a quantum mechanical framework, and the Laplace transform method. The solution obtained shows that the stochasticity introduced plays an important role in memory effects that are caused by the different fluctuations that both particles fell around a common mean value. In addition, it was used in the model counter-terms corresponded to individuals Brownian particles (1) and this approach generated an effective potential that contains an interaction term between the particles that is mediated by the bath. Setting the coefficients coming from the stochastic parameter to zero and a cutoff frequencies' bath much larger than the system's frequencies, it was verified an intersection with the non-linear coupling model (2) in its short distances and classical regimes. The next steps of the present project are 1) characterize the non-Markovianity of the dynamics due different types of correlations and a finite cutoff frequencies' bath and 2) study systems that don't show translational invariance and have direct interactions between the particles.

Palavras-chave: Sistemas abertos. Não-markovianidade. Banho de osciladores.

Referências:

1 CALDEIRA, A. O.; LEGGETT, A. J. Quantum tunneling in a dissipative system. **Annals of Physics**, v. 149, n. 2, 374-456, 1983.

2 DUARTE, O. S.; CALDEIRA, A. O. Effective coupling between two Brownian particles. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 25, 250601-1-250601-4, 2006.

IC4

Estudo de técnicas de aprisionamento óptico baseadas em modulação acusto-óptica

CALVELLO, V. S.[1]; SEGURA, C. O. O.[1]; SILVA, P. F.[1]; MUNIZ, S. R.[1]

victor.calvello.santos@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: A motivação por trás deste projeto é o desenvolvimento de técnicas experimentais de aprisionamento de partículas em potenciais ópticos produzidos por modulação acusto-óptica de um feixe laser, através da varredura rápida da posição do feixe, de tal forma que a média temporal da distribuição de intensidade luminosa permite escrever o padrão desejado. O objetivo é utilizar essa técnica para gerar potenciais arbitrários de interação radiação-matéria (luz-átomos, por exemplo), para o aprisionamento e manipulação dinâmica de condensados de Bose-Einstein ou nanopartículas aprisionadas em pinças ópticas. Objetivos de longo prazo incluem a construção de um simulador quântico universal (1) e outros estudos de informação quântica, que são atualmente explorados no nosso laboratório. Métodos e Procedimento: O *hardware* para a geração do potencial óptico utiliza um modulador acusto-óptico (AOM) associado a um sistema de geração e controle de radiofrequência, controlado por computador. Isso permite modular espacialmente a intensidade do feixe laser, a partir do controle da frequência e amplitude da RF aplicada ao AOM. O método experimental consiste na construção e caracterização do dispositivo que gera e controla a RF, aliado ao controle computacional do dispositivo. O estágio final do projeto pretende explorar esses controles no aprisionamento de partículas numa pinça óptica. Resultados:Até o momento, o dispositivo gerador de RF foi construído e sua caracterização de frequência foi feita. Conclusões: A calibração do controle de frequência do dispositivo segue o comportamento esperado. Outros parâmetros também estão sendo caracterizados atualmente. Os próximos passos envolvem a integração dos dispositivos com a calibração óptica *in-situ* do modulator AOM, juntamente com o desenvolvimento do software de controle e estudo das melhores estratégias de correção automática, visando o controle em tempo real do potencial óptico gerado pelo sistema.

Palavras-chave: Potenciais ópticos. Modulação acusto-óptica. Pinça óptica

Referências:

1 FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 21, n. 6-7, p. 467-88, 1982.

IC5

Espectroscopia Raman no diagnóstico de doenças relacionadas ao envelhecimento em diferentes tecidos: cristalino, pele e osso

CAVALLINI, D.[1]; NASCIMENTO, G. F. do[1]; MATTOS, V. S.[1]; MATOS, L. de[1]; PAOLILLO, F. R.[1]; CASTRO NETO, J. C. de[1]

daniel.cavallini@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto visa a análise do envelhecimento em diferentes tecidos através da comparação entre tecidos saudáveis e doentes utilizando Espectroscopia Raman. (1) Foram realizados a espectroscopia óptica da pele de 10 sujeitos saudáveis e 10 diabéticos, 5 cristalinos de porcos saudáveis e 5 com catarata, 5 ossos saudáveis de ratas e 5 com osteoporose induzida por ovariectomia. O espectrômetro Raman utilizado foi produzido pela Ocean Optics Inc. (Dunedin, FL, USA), com um Laser de diodo ($\lambda = 785nm$) e resolução espectral de $11cm^{-}1$. O Laser foi incidido em 90° em relação à amostra, com potência de 370 mW para o cristalino, 10mW para a pele e 130mW para o osso. O tempo de integração foi de 10s, com 3 acumulações para a pele o osso, para o cristalino utilizou-se 8 s e 7, respectivamente. Para aquisição dos dados foi utilizado o software SpectraSuite® (Ocean Optics, Inc., Dunedin, FL, USA). No processamento dos dados realizou-se a remoção da linha de base e suavização das curvas usando o software MATLAB®(MathWorks). A partir da análise da figura obtida é possível perceber um aumento na intensidade de alguns picos no tecido doente em relação ao saudável, bem como é possível observar picos que estão presentes nos três tecidos. A identificação dos picos é essencial para o entendimento do modo de envelhecimento destes tecidos: A região de 800 – 1000 cm-1 são observados os picos dos AGEs. Também é possível identificar a presença dos picos referentes à Amida I e III, constituintes do colágeno, dos picos de carboidratos, carotenóides e lipídeos. A presença de marcadores de envelhecimento nos diferentes tecidos elucida uma possível causa do envelhecimento acelerado em pacientes como diabéticos.

Palavras-chave: Diabetes. Diagnóstico. Espectroscopia Raman. AGEs.

Referências:

1 BARBOSA, J. H.P.; OLIVEIRA, S. L.; SEARA L. T. O papel dos produtos finais da glicação avançada (AGEs) no desencadeamento das complicações vasculares do diabetes. **Arquivos Brasileiros de Endocrinologia & Metabologia,** v. 52, n. 6, p. 940-950, 2008.

IC6

Modelo simplificado para decaimentos do Higgs e dados do LHC

BOTELHO JUNIOR, M. V.[1]; BOITO, D. R.[1]

moacyr.botelho@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto visa o estudo do decaimento do bóson de Higgs em partículas conhecidas do Modelo Padrão (SM) e pode ser dividido em duas partes principais. Inicialmente, foi feito um estudo das Regras de Feynman para partículas escalares, que é uma simplificação do modelo. Esse estudo foi baseado na referência (q) e é necessário para calcular a largura de decaimento Γ de cada canal e a razão de ramificação. A parte final do projeto inclui o spin das partículas no cálculo de Γ . Para isso, foi feito um estudo da equação de Dirac e a aplicadas Regras de Feynman, agora para partículas com spin. (1) Calculamos a razão de ramificação do decaimento do Higgs em pares de férmions e anti-férmions, no SM em ordem dominante a fim de comparar os resultados com cálculos em ordem maior. (2) Dessa forma, é possível verificar se os cálculos em ordem dominante são uma boa aproximação.

Palavras-chave: Bóson de Higgs. Decaimento de partículas. Modelo padrão.

Referências:

1 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to elementary particles**. 2nd ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2008.

2 DJOUADI, A. The anatomy of electroweak symmetry breaking: Tome I: the Higgs boson in the standard model. **Physics Reports**, v. 457, n. 1-4, p. 1-216, 2008.

IC7

Caracterização óptica de ácidos nucleicos a partir de plásmons poláritons de superfície

CLEMENTINO, L. O. D.[1], MAREGA JÚNIOR, E.[1]

livia.clementino@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho tem o intuito de aliar as propriedades ópticas de ácidos nucleicos ao fenômeno de plásmons poláritons de superfície em nanoestruturas metálicas, o que pode fornecer informações rápidas e importantes sobre amostras de DNA a serem analisadas. (1-3)

Palavras-chave: Fluorescência. Caracterização de DNA. Plásmons de superfície.

Referências:

1 BRATIFICH, R. **Fabricação e caracterização de nanoestruturas metálicas para aplicações em dispositivos plasmônicos**. 2015. 107p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos,Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

2 MAIER, S. A. **Plasmonics:** fundamentals and aplications. New York: Springer Verlag, 2007.

3 PLASMONICS. Disponível em: <https://www.physik.hu-berlin.de/de/nano/lehre/Gastvorlesung%20Wien/plasmonics>.Acesso em: 22 ago.2017.

IC8

Cristalização do vidro Bi2O3.B2O3 induzida por laser de femtossegundos

CORRADINE, G.[1]; ALMEIDA, J. M. P. de[2]

isadora.corradine@usp.br

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto Fisica de São Carlos - USP

O controle da cristalização em vidros tem proporcionado o desenvolvimento de vitro-cerâmicas transparentes com propriedades ópticas interessantes. No entanto, a utilização de tratamento térmico impede que a cristalização seja controlada espacialmente. "Assim, o objetivo deste trabalho é o controle da cristalização em escala micrométrica usando o laser femtossegundos (fs), visando a arquitetura de cristais ópticos não-lineares em vidros para aplicações em dispositivos ópticos." (1) O vidro $75B_2O_3.25Bi_2O_3$(%mol) foi preparado pelo método de fusão e moldagem, em cadinho de platina e T_m=750°C. Realizou-se tratamento térmico em 400°C/12h para alívio de tensões. Foi utilizado o laser de fs – Ti:Safira – operando a 5 MHz com pulsos de 50 fs em 800 nm, que incidem na amostra através de uma lente objetiva. A amostra é movimentada em relação ao feixe de laser por estágios de translação nos eixos XYZ. Uma câmera CCD é utilizada para acompanhar o processo. Variam-se dois parâmetros: abertura numérica da lente objetiva (NA =0,4 ou 0,65) e a energia do pulso, enquanto a velocidade de varredura foi mantida constante. Para a cristalização das regiões irradiadas, realizou-se ataque químico em solução aquosa de KOH [1g/L], 5min-63h. Além disso, foi observado o comportamento das larguras das regiões ablacionadas em função da energia do pulso e, através da equação $L = \alpha * ln(E/Eth)$ foi determinada a energia limiar do dano (Eth) de 7 nJ, correspondendo ao mínimo de energia necessária para causar alterações no vidro utilizando NA=0,65. A fase cristalina formada foi analisada por Espectroscopia Raman e determinou-se a formação da fase α-Bi2O3. Sendo assim, o vidro apresentou cristalização induzida pela escrita a laser revelando o potencial do método para o controle espacial da formação de cristais em escala micrométrica.

Palavras-chave: Laser.Cristalização.Vidro.

Referências:

1 ALMEIDA,J. M. P. at al. Architecture of lead oxide microcrystals in glass: a laser and etching based method. **CrystEngComm,** v.18, n.31, p.5959-64,2016.

IC9

Estudo de métodos de RMN no domínio do tempo em baixo campo para investigação de sistemas poliméricos

COSTA, R. G. L.[1]; FILGUEIRAS, J.[1]; DEAZEVEDO, E. R.[1]

raquel-glc@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo foi o aprendizado e aplicação de métodos de Ressonância Magnética Nuclear no domínio do tempo visando o estudo de características de sistemas poliméricos. Foram realizados estudos de princípios básicos de RMN, experimentos padrões e estudos sobre os princípios quânticos de RMN (1), com destaque para a interação dipolar entre os spins, para então entender o funcionamento de um método de filtro dipolar, denominado DF-MSE ("Dipolar Filtered Magic Sandwich Echo"). A técnica de DF-MSE se baseia no fato de que núcleos de^{1}H rígidos, ou seja, em segmentos moleculares que possuem baixa mobilidade, apresentam forte interação dipolar, fazendo com que o seu sinal de RMN decaia rapidamente. Por outro lado, o sinal correspondente a núcleos de^{1}H em segmentos moleculares que apresentam mobilidade molecular mais rápida que o inverso da frequência da interação dipolar decai muito mais lentamente. Isso se deve ao fato da interação dipolar entre os núcleos de hidrogênio depender da orientação em relação ao campo magnético aplicado no experimento de RMN. Logo movimentos moleculares fazem com que o Hamiltoniano dessa interação seja promediado e o seu efeito no sinal de RMN seja reduzido. Efetivamente, o chamado filtro dipolar (2) usa essa diferença de comportamento entre os sinais provenientes de segmentos rígidos e móveis para filtrar o sinal dos segmentos rígidos, fazendo com que somente os núcleos de^{1}H em segmentos móveis contribuam para o sinal detectado após a aplicação do filtro. Assim, se realizado como função da temperatura, a intensidade do sinal detectado, (intensidade DF-MSE) será modificada toda vez que segmentos moleculares iniciarem movimentos com taxa da ordem do inverso do acoplamento dipolar, tipicamente da ordem de dezenas de kHz para núcleos de^{1}H. Isso permite que as temperaturas de início de processos associados à dinâmica molecular de diferentes segmentos moleculares dos materiais possam ser facilmente identificadas. Como exemplo de aplicação, avaliamos a sensibilidade técnica de DF-MSE na detecção de movimentos relacionados ao desordenamento e reordenamento de cadeias poliméricas (transição ordem-desordem) associados ao processo denominado autorregeneração (do inglês "self-healing"). Na autorregeneração, após o material sofrer um dano mecânico (uma trinca, por exemplo) as cadeias dos polímeros podem se rearranjar de modo a reconstruir a região afetada se aquecidas a temperaturas mais altas que uma temperatura típica e depois resfriadas. Esse é o caso de cadeias de polietileno, $[CH_2 - CH_2]_n$, terminadas por segmentos do ácido metacrílico neutralizado com íons de sódio, $CH_2C(CH_3)COO^-Na^+$, ®Surlyn. O sistema forma aglomerados iônicos, cujo ordenamento e desordenamento estão associados ao processo de autorregeneração. Nossos resultados permitiram identificar duas temperaturas características do início de movimentos moleculares. A primeira associada à transição ordem-desordem e a segunda a fusão da fase cristalina da amostra. Portanto, a técnica DF-MSE é sensível a transições associadas ao ordenamento de fases, sendo possível separar a contribuição associada a transição ordem-desordem e a fusão da fase cristalina. Isso permite um estudo detalhado dos movimentos moleculares associados à transição ordem-desordem, usando DF-MSE.

Palavras-chave: RMN no domínio do tempo. Movimentos moleculares. Autoregeneração de polímeros.

Referências:

1 DUER, M. **Introduction to solid-state NMR spectroscopy**. Oxford: Wiley-Blackwell, 2005.

2 GOLDMAN, M.; SHEN, L. Spin-spin relaxation in LaF3s. **Physical Review**, v. 144, n. 1, p. 321, 1966.

3 REYNOLDS, P. J. **A surlyn R ionomer as a self-healing and self-sensing composite**. 2012. 194 p. (Masters thesis) - Universidade de Birmingham, Birmingham, 2012.

IC10

Caracterizando cidades do mundo por sua topologia

DOMINGUES, G. S.[1]; SILVA, F. N.[1]; COMIN, C. H.[1]; COSTA, L. da F.[1]

guilherme.domingues@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os objetivos deste projeto foram estudar a organização de cidades em termos de suas propriedades topológicas; Expandir os resultados e o banco de dados do trabalho anteriormente desenvolvido pelo grupo (1); E caracterizar a distribuição das cidades nos espaços de atributos (medidas topológicas) utilizando métodos de agrupamento não-supervisionado, com o objetivo de identificar possíveis agrupamentos. Foi usada uma abordagem de Redes Complexas (2), que consiste em utilizar a estrutura de grafos para representar sistemas. Utilizando dados obtidos a partir do projeto OpenStreetMaps[1], extraímos informações sobre o sistema de ruas das cidades e a representamos através de redes. (3) Após, aplicamos a metodologia desenvolvida (1) para delimitar a região urbana de cada cidade. Em seguida, obtivemos algumas medidas das redes para classificar as cidades, utilizando o método PCA (Principal Component Analysis). Analisando o PCA construído notou-se que as cidades tendem a se agrupar de acordo com suas topologias e verificamos as relações dos eixos do PCA com o tamanho das redes e seus respectivos graus médios. Nenhum dos dois primeiros eixos do PCA apresentou correlação com o tamanho das redes. Porém, apenas o primeiro eixo do PCA apresentou correlação significativa com o grau médio das redes, enquanto o eixo PCA2, que se mostrou separar as cidades de acordo com seus continentes, não apresentou esta relação. Foi possível identificar uma relação nestas cidades entre suas estruturas topológicas e suas localizações geográficas, em particular, seus continentes. Também verificamos que o grau médio das redes parece ter forte relação com a principal componente do PCA, indicando que o número de interconexões das ruas de uma cidade é um parâmetro importante na sua caracterização topológica.

Palavras-chave: Redes complexas. Sistemas complexos. Modelagem de cidades.

Referências:

1 COMIN, C. H.; SILVA, F. N.; COSTA, L. da F. A diffusion based approaches to obtaining the relevant borders of urban areas. **Journal Statistical Mechanics**. v. 053205, 2016. doi: 10.1088/1742-5468/2016/05/053205.

2 ALBERT, R.; BARABASI, A.L. Statistical mechanics of complex networks. **Reviews of Modern Physics**, v. 74, n. 1, p. 47–97, 2002. doi: 10.1103/RevModPhys.74.47.

3 STRANO, E. et al. Urban street networks, a comparative analysis of ten European cities. **Environment and Planning B**: planning and design. v. 40, n. 6 p. 1071-86, 2013.

IC11

Estudo de potenciais ópticos produzidos por holografia digital

DONATO, M. H. F.[1]; MUNIZ, S. R.[1]

mariohfdonato@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Estudar a produção de potenciais ópticos produzidos pela técnica de modulação espacial da fase de um feixe laser, via holografia digital. O objetivo é estudar os limites fundamentais e práticos envolvidos na criação de potenciais de altíssima resolução óptica e baixo ruído. Métodos e Procedimentos: Para se produzir os potenciais ópticos utilizou-se um modulador espacial de luz (SLM), cuja função é controlar a fase espacial de cada ponto da frente de onda de um feixe laser, partindo de um perfil de intensidade gaussiano até produzir o padrão de intensidade desejado. Para determinar a fase a ser aplicada ao feixe incidente no SLM, foram estudados e utilizados três algoritmos iterativos de busca que, dadas as amplitudes do campo elétrico no plano do SLM e da imagem alvo final, calculam a fase a ser adicionada no feixe inicial. (1) Os algoritmos estudados foram: *Gerchberg-Saxton* (GS); *Mixed Region Amplitude Freedom* (MRAF) e *Offset Mixed Region Amplitude Freedom* (OMRAF). Além dos estudos numéricos, foram realizados também estudos experimentais. Resultados: Tivemos sucesso em produzir os hologramas necessários e implementá-los no laboratório. A análise da razão sinal-ruído dos potenciais produzidos confirma que o método GS causa a maior quantidade de ruído (como era esperado, a partir das simulações numéricas), enquanto o método OMRAF produz, em geral, o melhor resultado. Apesar disso, os ruídos encontrados experimentalmente ainda são bem maiores que os encontrados nos cálculos numéricos e reportado na literatura (1), indicando que ainda são necessários mais estudos, para entender e melhorar a qualidade (suavidade) dos padrões ópticos produzidos no laboratório. Com a produção dos potenciais ópticos pelos três métodos discutidos (implementados no laboratório), observa-se que os níveis de ruído de cada método condizem com a literatura (1), pelo menos qualitativamente. Entretanto, os ruídos encontrados experimentalmente ainda são muito maiores do que aqueles obtidos numericamente. Apesar de ainda serem apenas os primeiros resultados experimentais em nosso laboratório, isso é crítico para aplicações em armadilhas ópticas para gases quânticos (BECs), que são extremamente sensíveis, mas os potenciais atuais já permitem produzir padrões complexos e bem realísticos, que podem ter aplicações interessantes em pinças ópticas, que estão sendo atualmente estudadas em no nosso laboratório.

Palavras-chave: Aprisionamento óptico. Holografia digital. Simulação quântica.

Referências:

1 GAUNT, A. L.; HADZIBABIC, Z. Robust digital holography for ultracold atom trapping. **Scientific Reports**, v. 2, p. 721-1-721-5, 2012. doi: 10.1038/srep00721.

IC12

Toxicidade aguda e geração de espécies reativas ao oxigênio em zebrafish (Danio rerio) expostos à nanorods de ouro

DRESSLER, B.[1]; SOUZA, J. P.[2]; ZUCOLOTTO, V.[2]

barbaradressler@hotmail.com

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2]Instituto de Física de São Carlos – USP

Objetivos: Os objetivos deste estudo foram avaliar os efeitos da exposição do peixe Danio rerio aos nanorods de ouro (AuNRs) a partir da determinação da concentração letal média (CL50), e ainda avaliar os efeitos da exposição subletal sobre a geração de Espécies Reativas ao oxigênio (EROs) como mecanismo de ação tóxica dessas nanopartículas. Métodos e Procedimentos: AuNRs foram sintetizados de acordo com. (1) Peixes adultos foram expostos às concentrações: 0,0 (controle); 0,15; 0,22; 0,30; 0,45, 0,60 e 0,75 mg L-1 de AuNRs durante 96 h. Ao final da exposição foi determinada a concentração de AuNRs que causa efeito agudo (mortalidade) à 50% dos organismos expostos (CL50). Os organismos foram expostos ainda à concentrações subletais (0,0375; 0,075; 0,15 mg L-1) durante 24 h para avaliação da geração de EROs como mecanismo de ação tóxica. Variáveis de qualidade da água como pH, temperatura e oxigênio dissolvido foram monitoradas. AuNRs foram caracterizados quanto à distribuição de tamanho e potencial zeta após a síntese e nos meios de exposição. Resultados: Os AuNRs apresentaram tamanho médio transversal e longitudinal de aproximadamente 5 e 50 nm respectivamente. O potencial zeta foi de $+24{,}2 \pm 0{,}3$ mV. A CL50-96h estimada foi de 0,19 mg L-1. Não foi possível observar um padrão dose x resposta que pudesse inferir a geração das EROs como mecanismo de ação tóxica pela exposição aos AuNRs. Os parâmetros de pH, oxigênio dissolvido e temperatura foram adequados para os organismos e não sofreram alterações durante as 96 horas de exposição. Conclusões: Os AuNRs causaram toxicidade aguda aos organismos na concentração de 0,19 mg L-1. No entanto, não foi possível medir a geração de EROs. Possivelmente alguns fatores contribuíram para esse resultado como o tempo de exposição dos organismos, as concentrações testadas, o mecanismo de ação tóxica analisado e o método utilizado pode não ter sido adequado para a detecção das EROs. A fim de solucionar essas dúvidas novas análises estão sendo realizadas.

Palavras-chave: Zebrafish. Espécies reativas ao oxigênio. Nanorods de ouro.

Referências:

1 SAU, T. K.; MURPHY, C. J. Seeded high yield synthesis of short Au nanorods in aqueous solution. **Langmuir**, v. 20, n. 15, p. 6414-6420, 2004.

IC13

Implementação de métodos numéricos para análise de sinais de Ressonância Magnética Nuclear no domínio do tempo

FENERICK, R.[1]; MORAES, T. B.[2]; DEAZEVEDO, E. R.[2]

rafael.fenerick@usp.br

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Um objetivo comum na análise experimental de dados de um experimento de Ressonância Magnética Nuclear no domínio do tempo (RMN-DT) é a determinação da distribuição de tempos de relaxação ou coeficiente de difusão, que nos casos de sinais ruidosos, consistem em um problema matemático mal-posto. (1) A solução desse problema é obtida através das integrais de Fredholm, que podem ser resolvidas com o método de Regularização de Tikhonov, com decomposição em valores singulares. (2-3) O objetivo desse projeto de iniciação científica é implementar e comparar alguns métodos de regularização de Tikhonov em linguagem de programação Origin C, possibilitando assim a utilização dessas funções diretamente no software Origin Lab 2017. Além dos experimentos tradicionais de RMN-DT, que apresentam função *kernel* exponencial, nesse projeto avaliaremos as possibilidades de implementar métodos com *kernel* gaussiano-lorentiziano misto, entre outras funções *kernels* necessárias para análise de experimentos mais complexos, como adquiridos com sequências de pulsos DF-MSE (*Dipolar filter Magic Sandwich Echo*), e experimentos de Difusão de Spins. São apresentados os resultados obtidos até o momento, utilizando dados simulados e sinais reais adquiridos no espectrômetro de 20 MHz Minispesc mq20 da Bruker.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear.

Referências:

1 SONG, Y.-Q. Magnetic Resonance of Porous Media (MRPM): a perspective. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 229, p. 12-24, Apr. 2013. doi: 10.1016/j.jmr.2012.11.010.

2 BORGIA, G. C.; BRONW, R. J. S.; FANTAZZINI, P. Uniform-penalty inversion of multiexponential decay data. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 132, n. 1, p. 65-77, 1998.

3 TIKHONOV, A. N.; ARSENIN, V. Y. **Solutions of ill-posed problems**. Washington: Winston, 1977. 258 p. (Scripta series in mathematics).

IC14

Transferência de nanopartículas por indução a laser

FERREIRA, P. R.[1]; ALMEIDA, J. M. P. de[1]; MENDONÇA, C. R.[1]

paulina.ferreira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A atual demanda por instrumentos ópticos e eletrônicos de pequena escala tem incentivado o desenvolvimento de técnicas de processamento de materiais, nas quais escrita direta por laser tem um importante papel. Dentre estes métodos a transferência induzida a laser (LIFT, em inglês) tem se mostrado muito eficiente dado a quantidade de materiais e que podem ser impressos em variadas superfícies. LIFT normalmente é empregado com pulsos de laser de ns (1), que vêm a causar danos térmicos ao material. Procurando evitar tais danos, esta pesquisa foca na utilização de pulsos de femtosegundo para deposição controlada de metais em escala micrométrica. Ainda, procura-se a influência das condições experimentais (potência, velocidade de varredura, espaçamento) na impressão de metais nobres via fs-LIFT. LIFT é uma técnica de escrita direta, a laser que utiliza pulsos de laser para transferir substâncias através de um espaçamento micrométrico entre dois substratos, um doador transparente e um receptor. O substrato doador é recoberto com um filme metálico posicionado em direção à superfície do aceptor. Um estágio de translação xy segura ambos os substratos e permite a escrita de um padrão 2D. A superfície dos substratos estão separadas por duas colunas alocadas nas bordas do receptor. O feixe de um laser Ti:Al2O3 (50 fs, 800nm, 5MHz) é focado no substrato doador por uma objetiva de microscópio, irradiando laser e propelindo uma microgota que atinge o receptor através do espaçamento em regiões controladas. A técnica de fs-LIFT foi aplicada a Au e Ag para potência entre 110 mW a 250 mW, em intervalos de 50 mW e varreduras de 50, 100 e 500 μm. Em (2) há um típico espectro de absorbância de metal depositado por fs-LIFT. A banda em 520 nm mostra a existência de nanopartículas de Au no substrato doador. Foi observado que a intensidade da banda aumenta para potências mais altas e menores velocidades de varredura, e também, houve maior densidade espacial de material impresso nos espaçamentos menores, de 1 e 3 μm. Resultados preliminares indicam a existência de nanopartículas no aceptor também para filmes de Ag. Com os dados até então obtidos, é possível concluir que fs-LIFT permite a impressão de padrões 2D de nanopartículas, fato não observados para pulsos de período mais longo. Também, que a qualidade das deposições melhora em potências mais altas e velocidades de varredura mais baixas.

Palavras-chave: Transferência induzida a laser. Pulsos de femtosegundos. Filmes de ouro.

Referências:

1 WILLIS, D. A.; GROSU, V. Microdroplet deposition by laser-induced forward transfer. **Applied Physics Letters**, v. 86, n. 24, p. 244103-1-244103-3, 2005.

2 TSENG, M. L. et al. Fabrication of phase-change chalcogenide $Ge_2Sb_2Te_5$ patterns by laser-ced forward transfer. **Optics Express**, v. 19, n. 18, p. 16975-16984, 2011.

IC15

Otimização de uma Armadilha Magneto-Óptica de Estrôncio

FRANKLIN, L. C.[1]; COURTEILLE, P. W.[1]

leonardo.franklin@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de condensados de Bose-Einstein obtidos por estrôncio utiliza equipamentos que precisam ser ajustados regularmente de forma que se otimize os resultados esperados. Para isso, é necessário variar estes parâmetros para melhor desempenho do experimento. O estudo em questão disserta sobre alguns métodos utilizados para tal tarefa. Os condensados são obtidos através de armadilhas magneto-ópticas que conseguem fazer os átomos chegarem a temperaturas de micro K. (1)

Palavras-chave: Magneto-Optic trap. MOT. Armadilha magneto-óptica de estrôncio.

Referências:

1 COURTEILLE, P. W. **Óptica de ondas de matéria**. São Carlos: IFSC/USP, 2015. Apostila.

IC16

Estudo do Efeito Vascular da Terapia Fotodinâmica com o uso de diferentes curcuminas

FREITAS, L. C. F. de[1]; BUZZÁ, H. H.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

lucas.cff05@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Conjugar o efeito vascular da terapia fotodinâmica à ação antiangiogênica da curcumina, testando diversas concentrações, utilizando de análise qualitativa e quantitativa, com e sem aplicação de luz. Métodos e Procedimentos: Para a realização do experimento foi utilizado ovos de galinhas fertilizados num modelo in vivo, chamado de modelo de membrana corioalantóica (CAM). Os experimentos aconteceram entre os ED11 e 14, devido aos vasos sanguíneos estarem num diâmetro adequado. Nesse período, o sistema nervoso central do embrião ainda não estar desenvolvido, o que não gera dor ao animal. Foi feito uma solução estoque de curcumina de 10 mM contendo 99% de álcool e 1% de DMSO. À partir dela, foram testados concentrações de curcumina diluídas em soro fisiológico de 0,1, 0,5 e 1 mM. Dentro do ovo foi colocado um anel de Teflon® de 1,76 cm^2 por 1 mm de espessura, usado para delimitar a área de tratamento. Um volume de 200μL da solução de curcumina foi incubada por 40 min e, então iluminou-se a região por 5 min com comprimento de onda de 450 nm e fluência de 45,5 mW/cm^2 por 5 min, totalizando uma dose de luz de 13,65 J/cm^2. Imagens foram tiradas num perído de 3 horas a cada 30 min e após 24 horas foram tiradas novamente para serem processadas numa rotina do MATLAB para a realização de uma análise quantitativa. (1) Resultados: A curcumina, com e sem aplicação de luz, apresentou um efeito vascular importante. Entretanto, quando existia o efeito fotodinâmico somado ao efeito da própria curcumina, a redução acontecia de maneira mais rápida. A análise após 24 horas apresentaram uma redução média de vasos sanguíneos em torno dos 20% em comparação aos testes realizados com a curcumina sem aplicação de luz, indicando que o efeito vascular causado pela terapia fotodinâmica permanece ao longo do tempo com o uso de curcumina. Conclusões: A curcumina é conhecida como uma substância que no escuro apresenta efeitos anti-oxidantes, anti-inflamatórios, anti-angiogênicos e anticâncer. (2) Além disso, vem sendo utilizada como fotossensibilizador e nas diferentes concentrações entre 0,1 à 1 mM apresentou um efeito duradouro tanto qualitativa quanto quantitativamente com aplicação de terapia fotodinâmica do que somente com curcumina.

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

Referências:

1 BUZZÁ, H. H. **Avaliação do efeito vascular da terapia fotodinâmica empregando derivados de porfirina e clorina na membrana corialantóica**. 2012. 93p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

2 MAHESHWARI, R. K. et al. Multiple biological activities of curcumin: a short review. **Life Sciences**, v. 78, n. 18, p. 20181, 2006. doi.org/10.1016/j.lfs.2005.12.007.

IC17

Impedimetric biosensors based on screen-printed interdigitated electrodes coated with carbon nano-onions: a new platform for detecting cancer biomarkers

FURUTA, R. H. M.[1]; IBÁÑEZ-REDÍN, G. G.[1]; WILSON, D. M.[1]; MELENDEZ, M. E.[2]; FREGNANI, J. H. T. G.[2]; CARVALHO, A. L.[2]; GONÇALVES, D.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de de[1]

roberto.furuta@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Hospital de Câncer de Barretos - HCB

Cancer is a leading cause of death in developed and developing countries; therefore its diagnosis at early stages is highly desirable. One methodology employed for cancer detection involve the use of non-faradaic biosensors fabricated with interdigitated electrodes, due to their ability to quantify low concentrations of analytes with high sensitivity even without requiring the use of markers and redox probes. (1) Electrodes fabricated by screen-printing technics have attributes of high interest to our goal: as being flexible, low cost and reproducible. (2) Despite these qualities, this technics have not been significantly explored for the development of interdigitated electrodes for capacitive biosensors. We fabricated a flexible biosensor for detecting cancer protein biomarkers using screen-printed interdigitated electrodes (SPIE). The device was employed for the detection of biological levels of pancreatic cancer biomarker CA19-9 with high sensitivity of (0.49 $\pm$ 0.01) F mL Unit.$^{-1}$ and low limit of detection of (0.142 $\pm$ 0.003) Unit. mL^{-1}. To produce the SPIE, silver ink was printed over a flexible platform made of poly(ethylene terephthalate) (PET) forming 8.5 m thick electrodes. The biosensor is composed by SPIE coated with carbon nano-onions (CNOs), graphene oxide (GO), and a top layer of anti-CA19-9 antibodies deposited by drop casting. To our knowledge, this is the first time that the potential of CNOs for the development of non-faradaic biosensors is explored. The incorporation of this interesting carbon nanomaterial significantly improve the analytical parameters of the device. These easily build, flexible and low cost immunosensors are a promising new tool for cancer biomarkers detection.

Palavras-chave: Capacitive biosensors. Screen-printed interdigitated electrodes. Carbon nano-onions.

Referências:

1 QURESHI, A. et al. Label-free capacitive biosensor for sensitive detection of multiple biomarkers using gold interdigitated capacitor arrays. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 25, n. 10, p. 2318-2323, 2010.

2 ARDUINI, F. et al. Electrochemical biosensors based on nanomodified screen-printed electrodes: recent applications in clinical analysis. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 79, p. 114-126, May 2016. doi: 10.1016/j.trac.2016.01.032.

IC18

Desenvolvimento e implementação de protocolos de processamento para quantificação de perfusão sanguínea cerebral utilizando arterial spin labeling

GALDIANO, M. D. B.[1]; PAIVA, F. F.[1]

miguel.galdiano@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: O objetivo do projeto foi desenvolver e implementar protocolos de processamento para quantificação de perfusão sanguínea cerebral a partir de dados de *Arterial Spin Labeling* (ASL). No caso, foram estudados dois métodos de obtenção de imagem funcional: ASL pulsado (PASL) e ASL pseudo-contínuo (pCASL). A partir dos mapas de perfusão obtidos, avaliamos as propriedades de cada método. Métodos e Procedimentos: Foram usados dados adquiridos previamente em um sistema de RM Achieva 3.0T. Foram utilizados três conjuntos de imagem para cada sujeito: uma imagem anatômica T1 3D e duas sequências de imagens ASL, uma PASL e uma pCASL. Realizadas e testadas as etapas de pré-processamento utilizando o SPM12, passamos para a etapa de geração dos mapas de perfusão. (1) Para isso, foi escrito um código de MATLAB que detecta a ordem em que os dados funcionais estão salvos e reordena cada um dos pares de imagens (marcação e controle). Feito isso, é feita a subtração dos respectivos pares, e, por fim, uma média de todos os pares, gerando assim um mapa proporcional a perfusão sanguínea cerebral. (2) Resultados: Muito embora ambos os métodos tenham dados origem a mapas de perfusão de qualidade diagnóstica, algumas diferenças puderam ser notadas. Os mapas de PASL apresentam maior contraste entre regiões de alta e baixa perfusão. Já os de pCASL apresentam uma maior relação sinal-ruído, além de possuir uma melhor resolução espacial. Essas mudanças são devidas às diferenças intrínsecas entre as técnicas. Como exemplo podemos citar o fato de que pCASL gera um estado estacionário de magnetização no sangue, resultando, assim, numa melhor relação sinal-ruído. (3) Conclusões: Foi estabelecida uma plataforma de processamento para gerar mapas de perfusão a partir de dados de ASL. Utilizando os mapas obtidos, realizamos uma análise qualitativa dos dois métodos. Determinamos que PASL apresenta maior contraste, enquanto que pCASL possui maior relação sinal-ruído e melhor resolução espacial.

Palavras-chave: Ressonância magnética. FMRI. Imagem asl. ASL. Arterial Spin Labeling.

Referências:

1 BARBIER, E.L.;LAMALLE, L.; DECORPS, M. Methodology of brain perfusion imaging. **Journal Magnetic Resonance Imaging**, v.13,n.4, p. 496-520,2001.

2 CALAMANTE, F. et al. Measuring cerebral blood flow using magnetic resonance imaging techniques. **Journal of Cerebral Blood Flow and Metabolism**, v. 19, n.7, p. 701-35,1999..

3 MAZZOLA,, A. A. Ressonância magnética: princípios de formação da imagem e aplicações em imagem

funcional. **Revista Brasileira de Física Médica.** v.3, n.1, p.17-29,2009.

IC19

Avaliação morfo-histológica do tubo digestório de larvas do Aedes aegypti submetidas ao fotossensibilizador curcumina (Curcuma longa L.)

GARBUIO, M.[1]; SOUZA, L. M. de[2]; VENTURINE, F. P.[3]; INADA, N. M.[3]; BAGNATO, V. S.[3]; BLANCO, K. C.[3]

m.garbuio@hotmail.com

[1]Centro Universitário Central Paulista - UNICEP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[3]Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto tem como objetivo estudar as alterações morfo-histológicas provocadas pelo fotossensibilizador (FS) curcumina sobre larvas do *Aedes aegypti*. Para cada recipiente, foram adicionados 250 mL de água destilada, nos quais foram inseridas 15 larvas. Os grupos foram divididos em: larvas expostas diretamente à luz solar na ausência do FS; larvas expostas indiretamente à luz solar na ausência do FS; larvas expostas ao FS no escuro; larvas tratadas com o FS nas concentrações de 1,8, 5,4 e 7,2 mg/L na presença de luz solar: luz direta e luz indireta. Após o período de tratamento, as larvas em estágio de letargia foram coletadas e fixadas em lâminas para análises histológicas. Todos os grupos expostos a luz, sem a presença do FS não apresentaram modificações morfológicas significativas. As larvas submetidas ao controle escuro por 8h não apresentaram mortalidade, entretanto foi observado danos estruturais no trato digestório, uma vez que esta substância apresenta alta atividade larvicida (reduzida no escuro). Nos demais tratamentos foi observado danos significativos em todo o mesentério da larva como alta vacuolização e formação vesicular no citoplasma, hipertrofia nuclear, destruição do bordo em escova, liberação de conteúdo citoplasmático das células, estratificação do epitélio e degeneração da membrana peritrófica. (1, 2) A avaliação morfo-histotológica das larvas do *Ae. aegypti* confirmou a atividade foto-larvicida da curcumina, mostrando danos significativos em todo o aparelho digestório.

Palavras-chave: Aedes aegypti. Inativação fotodinâmica. Histologia.

Referências:

1 VALOTTO, C. F.B. et al. Estudo das alterações morfo-histológicas em larvas de *Aedes aegypti* (Diptera, Culicidae) submetidas ao extrato bruto etanólico de *Sapindus saponaria*. **Revista de Patologia Tropical,** v.39, n.4, p.309-321. 2010.

2 BARRETO, C.F. et al. Estudo das alterações morfo-histológicas em larvas de *Aedes aegypti* submetidas ao extrato bruto etanólico de *Sapindus saponaria* Lin (Sapindaceae). **Revista de Patologia Tropical** , v. 35, n.1,p.37-57, 2006.

IC20

Pyrochlore supergroup minerals Raman spectroscopy

GARCIA, G. S.[1]; ANDRADE, M. B. de[1]; QUEIROZ, A. A. A. E. de[1]; ELLENA, J. A.[1]

gabriel2.garcia@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

During the 19th century, the characterization of minerals was based on the form of the crystals and their chemical compositions. After the development of the X-ray diffraction techniques, the mineral characterization quality was raised to another level. Nowadays, other techniques are also utilized, such as microprobe chemical analysis, Raman, IR, LIBS and Mössbauer spectroscopies. (1) This large amount of data generated is usually stored in databases, which became very useful for quick comparison or rigorous mineral characterizations. (1) In this work, we look into the Raman spectroscopy in order to identify minerals, more specifically, pyrochlore supergroup minerals. The Raman spectrum of the sample can be understood as the fingerprint of a mineral species. In order to explore the effects of the experimental conditions in the Raman spectra collected, we set different parameters during the analysis of a mineral specie from the microlite group. The spectrometer utilized was the Horiba's LabRAM HR Evolution. In order to avoid burning the samples, we started every analysis at low power ($\sim$ 1mW). The laser wavelength, deserved special attention because the incident radiation may generate the undesirable fluorescence effect, which masks the Raman spectra collected. Therefore, three different laser sources were used: green (532 nm), red (633 nm) and near infrared (785 nm). The Raman spectra of the first sample collected in the range 100 to 1400 cm^{-1}. It was possible to identify typical bands of microlite group minerals such as fluorcalciomicrolite, $(Ca,Na,\square)_2Ta_2O_6F$, and fluornatromicrolite, $(Na,Ca,Bi)_2Ta_2O_6F$. Also, we tried to identify the associated minerals. The preliminar inspection showed that most of the associated minerals were colorless or white. The Raman spectra were collected using the three different wavelengths mentioned previously and the results were compared to the RRUFF database. (2) Using the program CrystalSleuth (3), was possible to identify three possible candidates: synchisyte, $CaCe(CO_3)_2F$, braitschite, $(Ca,Na_2)_7(Ce,La)_2B_{22}O_{43}{\cdot}7H_2O$, and albite, NaAlSi3O8. However, the best results were obtained to albite. The next step is to obtain the chemical analysis and the cell parameters of the samples using the X-ray diffraction to confirm the identification. Summing up, this work reaffirms the importance of Raman spectroscopy in the mineral identification process.

Palavras-chave: Raman spectroscopy. Pyrochlore. Microlite.

Referências:

1 LAFUENTE, B. et al. The power of databases: the RRUFF project. In: ARMBRUSTER, T.; DANISI, R. M. (Ed.) **Highlights in mineralogical crystallography**. Berlin: De Gruyter, 2016. p. 1-29.

2 DOWNS, R. T. The RRUFF Project: an integrated study of the chemistry, crystallography, Raman and infrared spectroscopy of minerals. In: GENERAL MEETING OF THE INTERNATIONAL MINERALOGICAL ASSOCIATION, 19., Kobe, 2006. **Program and abstracts...** Bochum:

International Mineralogical Association, 2006.

3 LAETSCH, T.; DOWNS, R. Software for identification and refinement of cell parameters from powder diffraction data of minerals using the RRUFF project and american mineralogist crystal structure databases. In: GENERAL MEETING OF THE INTERNATIONAL MINERALOGICAL ASSOCIATION, 19., Kobe, 2006. **Program and abstracts...** Bochum: International Mineralogical Association, 2006.

IC21

Desenvolvimento, síntese supramolecular e caracterização de novas formulações sólidas de antidepressivos

GONÇALVES, L.[1]; ELLENA, J. A.[1]

larissancgoncalves@live.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho foi identificar e caracterizar as novas formas cristalinas dos fármacos antidepressivos Amitriptilina e Paroxetina, por meio das técnicas: Microscopia térmica, Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC), Termogravimetria (TGA) e Raman. Métodos e Procedimentos: O planejamento de novas estruturas pode se traduzir em fármacos com melhores perfis farmacocinéticos, capazes de gerar benefícios à população.(1) Para isto coformadores adequados foram selecionados a partir de análises estatísticas realizadas utilizando o banco de dados Cambridge. Na sequencia protocolos de cristalização foram desenvolvidos de acordo com a técnica de evaporação lenta. Os antidepressivos utilizados no processo de cristalização são encontrados como sais, sendo assim foi realizado uma extração dos fármacos para obtenção da forma neutra. Para Amitriptilina utilizou-se os coformadores inorgânicos: ácido nítrico, bromídrico e sulfúrico, destas foram obtidas três estruturas. Todas foram analisadas por calorimetria diferencial de varredura (DSC) e em seguida somente com ácido nítrico por microscopia térmica, no qual foi caracterizada como sendo nova forma sólida. Para Paroxetina, três novos sólidos foram obtidos, utilizando os ácidos oxálico, succínico e , benzóico. Todos foram analisados usando microscopia térmica, Análise Termogravimétrica (TGA), Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC) e espectroscopia Raman. Dessas, uma foi caracterizada como sendo nova forma sólida. Resultados e Conclusões: Tendo em vista os estudos realizados, pode-se concluir que para o fármaco Amitriptilina com ácido nítrico e Paroxetina com o ácido succínico, mostraram comportamentos térmicos diferentes dos insumos de partida usados como referência indicando a existência de novas formas sólidas.

Palavras-chave: Paroxetina. Amitriprilina. Novas formas sólidas.

Referências:

1 ALLEN, F.H. The Cambrige Structural Database: a quarter of a million crystal structures and rising. **Acta Crystallographica Section B:** structural science, v. 58, pt.3, p.380-388, 2002.

IC22

Estudos sobre a possibilidade de detecção indireta de matéria escura

KARASAWA, E. G.[1]; SOUZA, V. de[1]

eliane.karasawa@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Estudar a matéria escura, constituinte de mais de um quarto do universo: desde sua proposição até medidas atuais que evidenciam sua presença. A partir dos conhecimentos teóricos adquiridos, elaborar um código que simule o comportamento da matéria escura e da matéria bariônica sobre influência de forças gravitacionais e elétricas. Métodos e Procedimentos: Na parte teórica, estudou-se os principais artigos sobre o assunto, incluindo o do Zwicky (1), considerado o pai da matéria escura até uma atual revisão publicada na Nature sobre evidências da matéria escura na nossa galáxia. Para montar a simulação, cursou-se Astrofísica Moderna cuja ementa envolvia matéria escura e estudou-se alguns livros (2), artigos (3) e sites sobre simulação de n-corpos. Em conjunto, escreveu-se um código em c++ (para compatibilidade com o software ROOT) baseando-se no método preditor-corretor de Hermite de 4ª ordem e em intervalos de tempo variáveis descritos em. (3) Resultados: Analisando os artigos publicados na área, percebe-se que as evidências tornam a existência de matéria escura irrefutável, e o atual objetivo trata-se de detectar, direta ou indiretamente, a matéria escura, de forma a obter novas pistas de sua constituição. O método indireto visa, a partir da interação da matéria escura, detectar alguma anomalia naquilo que já conhecemos e é o princípio de experimentos como o AMS e o HESS. Quanto à simulação de n-corpos, embora não se trate de um problema recente, sua variante envolvendo matéria escura começou a ser explorada na década de 90 e trata-se de algo mais complexo do que a maioria encontrado na literatura pois envolve também forças elétricas. No momento, o código está escrito e sendo testado para o caso mais simples. O maior problema encontra-se na aproximação de partículas que tende a estourar as acelerações e correções estão em andamento para evitar que isso ocorra. Conclusões: Pouco sabemos sobre o universo (algo em torno de 5%) e o estudo da matéria escura mostra-se essencial. Nesse âmbito, a detecção indireta de matéria escura apresenta-se como mais promissora, uma vez que os indícios de sua presença também são indiretos. Quanto o problema computacional, não está funcionando plenamente, mas em breve estará pronta para ser utilizada, com todas as funcionalidades.

Palavras-chave: Matéria escura. Detecção indireta. Simulação de n-corpos.

Referências:

1 ZWICKY, F. On the masses of nebulae and of clusters of nebulae. **Astrophysical Journal**, v. 86, n. 3, p. 217-246, 1937.

2 AARSETH, S. J.; TOUT, C.; MARDLING, R. (Ed.). **The Cambridge n-Body lectures**. Berlin: Springer, 2008. (Lecture notes in physics, v. 760).

3 MAKINO, J.; AARSEHT, S. J. On a Hermite integrator with Ahmad-Cohen scheme for gravitational many-body problems. **Publications of the Astronomical Society of Japan**, v. 44, n. 2, p. 141-151, 1992.

IC23

Espaço Interativo de Ciências (EIC) do CIBFar: educação e difusão de ciências para São Carlos e região

KLEIN, A. K.[1]; CAMARGO, I. L. B. C.[1]; ARAUJO, A. T. de[1]; SANTOS, G. C.[1]

anderson.klein@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Identificar a percepção do público sobre elementos de uma exposição científica, assim como sobre a mediação realizada em um espaço de educação não formal (GASPAR, A. 1990) (1), o EIC. Os visitantes foram convidados a responder um questionário contendo seis perguntas sobre a sua compreensão de alguns elementos da exposição e mediação do monitor. A maioria (95%) dos visitantes pesquisados apontou que o museu despertou o interesse para os conteúdos apresentados. Da totalidade dos questionários preenchidos, 68% deles relataram um fácil entendimento do público em relação aos assuntos abordados. Uma vez que os assuntos podem ser bastante específicos e exigir conceitos de microbiologia e biologia molecular (2) muitas vezes não aprendido ou já esquecido, esse resultado pode ser explicado pela forma mais ilustrativa e interativa do conteúdo, o que pode ter facilitado a compreensão dos visitantes. Para os visitantes pesquisados, o desempenho dos monitores foi muito satisfatório, variando de "boa" para "ótima" na abordagem do conteúdo, conseguindo apresentar o conteúdo de forma que facilitasse a compreensão (84%) e estar disposto a sanar dúvidas (95%). De acordo com 79% do público pesquisado, os visitantes consideram a exposição dinâmica e interativa, isso se deve ao fato deste espaço apresentar de maneira não monótona os diferentes objetos expositivos, utilizando mídias interativas, microscópio para observação de alguns tipos de microrganismo, entre outros. As avaliações positivas em relação à exposição e a mediação realizada no EIC nos permitem vislumbrar formas de ação que realmente são efetivas na divulgação científica. A compreensão dos temas abordados durante a mediação com os diferentes públicos proporciona a conexão do conhecimento produzido nas universidades com a comunidade não acadêmica. Dessa forma, o Espaço contribui para o despertar do interesse pela Ciência, incitando a reflexão sobre as possíveis consequências para sociedade.

Palavras-chave: Educação não-formal. Museu. Pesquisa. Questionário. Avaliação.

Referências:

1 GASPAR, A. 1990. **A educação formal e a educação informal em Ciências.** Disponivel em: <http://www.casadaciencia.ufrj.br/Publicacoes/terraincognita/cienciaepublico/artigos/art14_aeducacaoformal.pdf>. Acesso em: 30 ago. 2017.

2 EIC - Espaço interativo das ciências. 2011. Disponível em: <http://eic.ifsc.usp.br/category/sobre-o-eic/>. Acesso em: 11 ago. 2017.

IC24

Jogos educativos como uma estratégia de prevenção de doenças

KUNITAKE, P. Y.[1]; COSTA, G. G. da[1]; BELTRAMINI, L. M.[1]

poliana.kunitake@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Nestes últimos anos o Brasil tem enfrentado um surto de doenças transmitidas pelo Aedes aegypti e o acesso à informação, especialmente sobre as formas de prevenção, é um importante aliado no combate destas enfermidades. O objetivo deste trabalho é apresentar o desenvolvimento de novos conteúdos para jogos que visam difundir aos seus usuários conceitos importantes sobre doenças transmitidas pelo Aedes aegypti, sendo elas: Dengue, Chikungunya, Febre amarela e Zika, de forma lúdica e interativa. O trabalho foi desenvolvido com 2 jogos: o Diagrama e o Jogo das Letras, disponível no portal do Espaço Interativo de Ciências – EIC (<http://eic.ifsc.usp.br>), que oferece acesso as suas mídias e jogos educacionais e oportuniza a inserção de novos conteúdos para estes recursos digitais. Os jogos selecionados são dinâmicos, atrativos e possuem uma excelente jogabilidade, além de o primeiro deles já estar integrado com a plataforma online "Currículo +" da Secretaria da Educação do Estado de São Paulo, o que poderá facilitar a utilização desta nova versão pelos professores. Identificação dos requisitos e restrições do jogo, levantamento bibliográfico (artigos, livros e sites), seleção dos assuntos que seriam abordados e desenvolvimento dos novos conteúdos, foram os procedimentos seguintes para a criação dos novos jogos. Para ambos os jogos escolhidos, o tema selecionado foi referente ao Aedes aegypti e as doenças transmitidas (Zika, Chikungunya, Febre amarela e Dengue). Para o desenvolvimento da nova versão do Diagrama foi necessário criar 200 perguntas referentes a cada tema proposto, com 5 alternativas, entre elas a correta. Além disso, foi preciso elaborar textos informativos para cada tópico (forma de transmissão, tratamento, sintomas, vetor, agente causador, fases do ciclo do mosquito e prevenção). Para o desenvolvimento do Jogo das Letras um total de 270 dicas foram formuladas e divididas para os temas presentes no jogo. Moran destaca a importância da utilização de mídias e jogos interativos em um contexto educativo e desta forma acreditamos que estes recursos despertarão o interesse e motivarão seus usuários em relação ao que está sendo apresentado. (1) Em um momento de crescimento do número de casos das doenças transmitidas pelo Aedes aegypti, a disseminação de conhecimentos adquiridos, como no uso dos jogos educativos, é extremamente relevante para a construção de um indivíduo consciente da importância do controle do mosquito e prevenção das enfermidades que ele pode transmitir.

Palavras-chave: Jogos educativos. Aedes aegypti. Prevenção.

Referências:

1 MORAN, J. M. Como utilizar a internet na educação. **Ciência da Informação**, v. 26, n. 2, 1997. doi: 10.1590/S0100-19651997000200006.

IC25

Efeitos termográficos da estimulação transcranial a laser e estimulação elétrica neuromuscular em pacientes com acidente vascular encefálico (AVE)

LUCCAS, G. A. A.[1]; PAOLILLO, F. R.[1]; CASTRO NETO, J. C. de[1]

giovana.luccas@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo principal foi avaliar os efeitos termográficos da Estimulação Transcranial a Laser e Estimulação Elétrica Neuromuscular (EENM) da extensão do punho e dorsiflexão do tornozelo dos membros paréticos de pacientes com Acidente Vascular Encefálico (AVE). Para avaliar a temperatura foi utilizada uma câmera termográfica IR-CAM com capacidade de detectar radiações no infravermelho distante. A temperatura corporal foi capturada antes e após a EENM, utilizando um estimulador de 4 canais FESMED IV (CARCI, São Paulo, Brasil) e imediatamente após a estimulação transcranial a laser (protótipo). Foi constatado o aumento significativo da temperatura na região da cabeça. Em relação à EENM houve um suave aumento da temperatura cutânea no braço, enquanto na perna não foi constatada diferença significativa. O aumento da temperatura na cabeça com o uso do laser indica aumento da circulação sanguínea para favorecer efeitos terapêuticos neurológicos. (1) Ainda, conclui-se que as técnicas de reabilitação utilizadas são seguras, pois não geram desconforto ao paciente e o aumento de temperatura não provoca queimaduras.

Palavras-chave: Efeito termográfico. Estimulação a laser. Estimulação transcranial

Referências:

1 LAPCHAK, P. A. Transcranial near-infrared laser therapy applied to promote clinical recovery in acute and chronic neurodegenerative diseases. **Expert Review of Medical Devices**. v. 9, n. 1, p. 71-83, 2012.

IC26

Propriedades estruturais e eletrônicas de quasecristais

MAGNO, G. F.[1]; ANDRADE, E. de C. e[1]

gabriel.magno@usp.br

A partir da construção do aproximante quadrado do Mosaico Octogonal, quasecristal 2-D (1), determinamos a posição espacial de todos sítios, bem como a conectividade da rede para entendermos suas propriedades geométricas e seu fator de estrutura no espaço recíproco. Em seguida, passamos para o estudo das funções de onda de elétrons em potenciais quase periódicos através da diagonalização exata de Hamiltonianos Tight-Binding (2), considerando hopping apenas entre primeiros vizinhos, nos já obtidos aproximantes quadrados. Utilizamos as autoenergias e os autoestados para o cálculo de observáveis físicos, como a densidade de estados (DOS), densidade de estados local (LDOS) (3), correlação espacial da LDOS, número médio de ocupação. Isto nos permitiu investigar assinaturas específicas que os estados eletrônicos de quasecristais deixam nessas quantidades físicas.

Palavras-chave: Quasecristais. Modelos tight-binding. Estados eletrônicos.

Referências:

1 DUNEAU, M. Approximants of quasiperiodic structures generated by the inflation mapping. **Journal of Physics A**, v. *22*, n. 21, p. 4549-4564, 1989.

2 REFAEL, G.; SHTENGEL, K. **Problems in quantum condensed matter**. Cambridge: Cambridge University Press, 2015.

3 COLLINS, L. C. et al. Imaging quasiperiodic electronic states in a synthetic Penrose tiling. **Nature Communications**, v. 8, p. 15961-1-15961-6, 2017. doi:10.1038/ncomms15961.

IC27

Biossensores amperométricos Quitosana/Tirosinase para detecção de Bisfenol A

MARION, S. C. F.[1]; CAVALHEIRO, E. T. G.[2]; CERVINI, P.[2]; GONÇALVES, D.[3]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de[3]

annymarion45@gmail.com

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química de São Carlos - USP

[3] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho consistiu em produzir biossensores e estudar métodos de análises para a detecção de bisfenol A (BFA) em amostras padrão. Foram construídos eletrodos de grafite poliuretano (GPU) simples e modificados com quitosana, em diferentes proporções, para a detecção eletroquímica de BFA (1). Com o eletrodo de GPU fez-se coating de quitosana em sua superfície, enquanto os modificados possuíam quitosana em sua estrutura. Estudou-se a atividade enzimática da enzima para determinar seu uso no eletrodo.Também foram preparadas soluções de BFA em diferentes concentrações molares. Para as medidas eletroquímicas, utilizou-se a técnica de voltametria de pulso diferencial (DPV). Além disso, também determinou-se o limite de detecção pelos biossensores. O biossensor construído apresentou uma resposta rápida e eficiente para a detecção do BFA em meio aquoso. Assim, apresentou-se como um método de detecção de baixo custo quando comparado às técnicas tradicionais, como a cromatografia (2). Além disso, o biossensor foi capaz de detectar o analito em concentrações de até 10^{-6} mol.L^{-1}.

Palavras-chave: Biossensor. Quitosana. Bisfenol A.

Referências:

1 CAVALHEIRO, É. T. et al. Development of graphite-polymer composites as electrode materials. **Materials Research**, v.10, n.2, p.109-114,2007.

2 WANGA, X. et al. 3D metal-organic framework as highly efficient biosensing platform for ultrasensitive and rapid detection of bisphenol A. **Biosensors and Bioelectronics**, v.65,p.295–301,2015.doi:10.1016/j.bios.2014.10.010.

IC28

Supernovas: origem ou não de raios cósmicos?

MARTINS, L. M.[1]; VECCHI, M. [1]

lucas.martins.maia@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Constantemente nosso planeta é bombardeado por raios cósmicos, partículas altamente energéticas vindas de fora do sistema solar. (1) Ao longo da última década, vários experimentos sugeriram características intrigantes no espectro de raios cósmicos. (2) Em particular, a transição no índice espectral do fluxo de prótons foi relatada por diferentes experimentos. O objetivo deste trabalho é fornecer uma possível interpretação deste fenômeno, no qual descreveremos o fluxo de prótons medido pelo experimento AMS-02 assumindo que os raios cósmicos são produzidos e acelerados na galáxia por duas classes de fontes de restos de supernova. Para a obtenção dos resultados, aliou-se três estudos assumiu-se um modelo de propagação de raios cósmicos (Leaky Box Model), afim de descrever sua origem e propagação na galáxia. Em conjunto, a análise da razão Boro-Carbono permitiu obter a propagação dos raios cósmicos no meio intergaláctico (3) e com o estudo do catálogo Fermi-LAT, houve a identificação das classes de remanescentes de supernova. Somando estes estudos foi possível a interpretação do fluxo de prótons do AMS-02, comparando o modelo proposto com os dados obtidos.

Palavras-chave: Raios cósmicos. Astrofísica. Remanescentes de supernova.

Referências:

1 GAISSER, T. **Cosmic rays and particle physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 1990.

2 TOMASSETTI, N.; DONATO, F. The connection between the positron fraction anomaly and the spectral features in galactic cosmic-ray hadrons. **The Astrophysical Journal Letters**, v. 803, n. 2, p. L15-1-L15-5, 2015.

3 AGUILAR, M. et al. Precision measurement of the boron to carbon flux ratio in cosmic rays from 1.9 GV to 2.6 TV with the Alpha Magnetic Spectrometer on the International Space Station. **Physical Review Letters**, v. 117, n. 23, p. 231102-1-231102-8, 2016.

IC29

Identificação de novos candidatos a agentes antitumorais

MARTINS, C. T.[1]; SILVA, E. M. G.[1]; MAGALHÃES, L. G.[1]; RUSSOWSKY, D.[2]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

carolina.teixeira.martins@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química - UFRGS

O câncer é um conjunto de doenças ocasionadas pela proliferação descontrolada de células anormais do organismo. (1) A terapia atualmente disponível apresenta limitações como alta toxicidade e baixa biodisponibilidade. Além disso, há o desenvolvimento de mecanismos de resistência aos fármacos existentes no mercado. Nesse contexto, o presente projeto de iniciação científica objetiva à identificação de novos candidatos a agentes antitumorais, cujo alvo molecular é a proteína tubulina, que sejam mais seguros e eficazes como alternativa às atuais opções terapêuticas para a doença. Para tanto, três séries de compostos foram avaliadas em ensaios celulares e bioquímicos: uma série de chalconas; uma de dihidropirimidinonas e uma de híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas. Para os ensaios celulares de citotoxicidade, de migração celular em câmara de Boyden e de migração celular wound healing, serão empregadas a linhagem celular tumoral MDA-MB-231, e a linhagem de fibroblastos humanos saudáveis, HFF1. Para avaliar a modulação dos microtúbulos, constituídos pela α e β tubulina, e também a alteração da morfologia do citoesqueleto devido à ação dos compostos, um ensaio de imunofluorescência com a linhagem tumoral será realizado.Ensaios de citotoxicidade contra células tumorais foram realizados e os compostos identificados como ativos apresentaram valores de CC50 (concentração citotóxica em que 50% dás células estão inviáveis) entre 0,78 e 10 M. Os menores valores de CC50 foram apresentados pelos híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas.Visando avaliar a seletividade dos compostos, a citotoxicidade contra uma linhagem não tumoral foi paralelamente estudada. Os resultados mostram que a série das chalconas apresentam o melhor perfil de seletividade. As séries de compostos selecionadas apresentaram boa atividade citotóxica frente a linhagem tumoral MDA-MB-231. Os híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas mostraram-se mais citotóxicos enquanto as chalconas se mostraram mais seletivas. O híbrido ML009 mostrou-se o composto mais promissor, apresentando alta citotoxicidade contra as células tumorais com citotoxicidade reduzida frente às células normais. Ademais, a maioria dos compostos mostraram-se eficientes moduladores da tubulina, aspecto avaliado paralelamente em outro projeto de iniciação científica.

Palavras-chave: Câncer. Química medicinal. Biologia celular.

Referências:

1 INSTITUTO NACIONAL DO CÂNCER. **Câncer**: o que é. Disponível em: <http://www2.inca.gov.br/wps/wcm/connect/cancer/site/oquee>. Acesso em: 25 ago. 2017.

IC30

Sistemas de átomos frios e condensados de Bose-Einstein: instrumentação para diagnóstico e controle

MAZO, P. L.[1]; CASTILHO, P. C. M.[1]; GUTIERREZ, E. D. M.[1]; MAGALHÃES, K. M. F.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; DUQUE, H. V.[1]; NAVARRO, J. C. A.[1]

pedrolmazo@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Além de acompanhar o desenvolver do experimento que visa a criação de uma rede de vórtices em um condensado de Bose-Einstein de duas espécies (1), o aluno desenvolveu atividades específicas que foram inseridas no experimento: a confecção e caracterização de um interferômetro de Fabry-Perot para análise e diagnóstico do sistema de lasers do potássio e a confecção de filtros passivos para remover o ruído do sistema. (2-3) O aluno também participou de atividades secundárias que se tornaram necessárias ao decorrer do projeto como a confecção de um par de bobinas que serão utilizadas na técnica de bombeamento óptico.

Palavras-chave: Interferômetro. Bose-Einstein. Espectroscopia.

Referências:

1 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. 043618-1-043618-5, 2009.

2 CASTILHO, P. C. M. **New experimental system to study coupled vortices in a two-species Bose-Einstein condensate 23Na-41K with tunable interactions**. 2017. 216 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

3 AKETAGAWA, M. et al. Free spectral range measurement of Fabry-Perot cavity using frequency modulation. **International Journal of Precision Engineering and Manufacturing**, v. 11, n. 6, p. 851-856, 2010.

IC31

Rotação não linear da polarização elíptica: refração e absorção de dois fótons

MELHADO, M. S.[1]; MISOGUTI, L.[1]

marlon.melhado@usp.br

Inicialmente estudamos a absorção não linear juntamente com o sinal de rotação não linear da polarização elíptica (RNLPE) em vidro óptico de F2 utilizando laser de Ti:safira. Essa caracterização é interessante pois, as medidas usuais de RNLPE (1) são realizadas na ausência de absorção não linear. No entanto, no caso do vidro F2, não tínhamos certeza quanto à origem da absorção não linear pois poderia ser de dois fótons ou mais fótons. Neste novo período, iniciamos investigações de propriedades ópticas não lineares de soluções de Rodamina-B (RdB) dissolvidas em Metanol (MTL), uma vez que a RdB é um bom material de calibração de absorção de dois fótons (A2F) quando excitado por laser de Ti:safira. Estas medidas então foram realizadas por meio da técnica de RNLPE com a medida simultâneas de refração e de absorção não linear. Assim, neste trabalho apresentamos as medidas de RNLPE de soluções de RdB, com diferentes concentrações. Resultados inesperados de refração não linear negativa foram observados.

Palavras-chave: Femtossegundo. Óptica não linear. Refração não linear.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L. et al. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick samples. **Applied Physics B**, v. 120, n. 4, p. 653-658, 2016.

IC32

Preparação de células fotovoltaicas orgânicas usando solventes verdes

MIRANDA, G. da S.[1]; SOUSA, L. M. de C.[1]; TORRES, B. B. M.[2]; BALOGH, D. T.[2]; FARIA, R. M.[2]

guilherme.silva.miranda@usp.br

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Visa-se à investigação do uso de solventes alternativos (1) aos comumente utilizados na preparação de células fotovoltaicas orgânicas, de preferência não-nocivos e de origem sustentável. Métodos e Procedimentos: Utilizou-se os solventes ciclohexanona, 2- metiltetrahidrofurano, ciclopentilmetiléter, 2- metilciclohexanona, 2-sec-butilciclohexanona, xileno e 1,2-diclorobenzeno no processo de preparação de OPVs de camada simples (2), sendo os dois últimos solventes usados como padrões de comparação de dispositivos convencionais. Para essa preparação, processos de fotolitografia, de deposição de camadas injetoras e de metalização de eletrodos foram realizados em diferentes condições. Foram então calculados os parâmetros de Jsc, Voc, FF e PCE relativos a cada tipo de dispositivo. Resultados: Notou-se que a eficiência do dispositivo preparado a partir de 2-metilciclohexanona com substrato a 120 °C corresponde a 82,7% do valor total da eficiência correspondente ao dispositivo de 1,2-diclorobenzeno (maior eficiência obtida), enquanto para o caso dos dispositivos preparados com 2-secbutilciclohexanona, a eficiência máxima obtida corresponde a 81,5% do valor dessa mesma eficiência. Observou-se também que os filmes de P3HT em 2-metilciclohexanona e 2-secbutilciclohexanona apresentam morfologia mais uniforme. Para os dispositivos preparados a partir de 2-metiltetrahidrofurano e xileno, foram observadas eficiências baixas. 0,0 0,7 1,4 -0,10 -0,05 0,00 0,05 0,10 0,15 0,20 Escuro Claro J(mA/cm2) Voltagem (V). Conclusões: Em suma, os valores de eficiência de conversão de potência (PCE) obtidos para cada tipo de dispositivo sugerem que os solventes 2-metilciclohexanona e 2-secbutilciclohexanona despontam como potenciais alternativas aos solventes comumente usados para confecção da camada ativa de OPVs.

Palavras-chave: Eletrônica orgânica. Células fotovoltaicas. Polímeros semicondutores. Solventes verdes.

Referências:

1 PARK, C. D. et.al. High performance bulk-heterojunction organic solar cells fabricated with non-halogenated solvent processing. **Journal of Organic Electronics:** physics, materials, applications, v. 12, n.9, p. 1465-1470, 2011.

2 RAY, B. R. et.al. Collection-limited theory interprets the extraordinary response of single semiconductor organic solar cell. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA**, v. 112, n.36, p. 11193-22298, 2015.

IC33

Localização de Anderson de luz em 3D: Relação espaço-temporal

MOREIRA, N. A.[1]; BACHELARD, R. P. M.[2]

noel.araujo.moreira@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Nesse trabalho foi estudado a interação entre luz escalar e uma nuvem de átomos pontuais distribuidos em três dimensões dentro de uma esfera, com um ênfase na localizacao de Anderson de luz. (1) Cada átomos possue dois níveis de energia, e uma taxa de decaimento efetivo γ. Devido a interação entre os átomos graças aos fótons trocados, modos coletivos de espalhamento aparecem, com as próprias taxas de decaimento. Os modos da luz dentro da esfera podem assumir formas estendidas, ou seja, se distribuem ao longo de todo o sistema, ou modos que são confinados em certa região, ditos modo localizados. Neste último caso, cada modo da luz dentro da nuvem possue decaimento espacial caracterizado pelo Comprimento de Localização ξ. Comprimento de localização e tempo de vida são duas variáveis importantes do modelo utilizado e mudam ao variar o número de partículas e a densidade dos sistema. O primeiro objetivo desse projeto foi entender se existe relação entre ξ e γ. E dentro das limitações para simular o modelo, há indicios de que há correlação, diferentemente do caso 2D. (2) O segundo foco desse projeto foi a transição de fase de modos estendidos para modos localizados que existe em 3D. Para caraterizar a transição de fase estudamos o comportamento dos comprimentos de localizacao e das taxas de decaimento perto da transição, determinando os exponentes críticos usando a Escala de Tamanha Finito. (3)

Palavras-chave: Localização de Anderson. Espalhadores pontuais. Comprimento de localização. Transição de fase.

Referências:

1 ANDERSON, P. W. Absence of dffusion in certain Random lattices. **Physical Review**, v. 109, p. 1492–1505, 1958. doi: 10.1103/PhysRev.109.1492. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.1492>. Acesso em: 11 jun. 2017.

2 MÁXIMO, C. E. et al. Spatial and temporal localization of light in two dimensions. **Physical Review A**, v. 92, n. 6, p. 062702, 2015. doi: 10.1103/PhysRevA.92.062702. Disponível em: <https://journals.aps.org/pra/pdf/10.1103/PhysRevA.92.062702>. Acesso em: 11 jun. 2017.

3 SKIPETROV, S. E. Finite-size scaling analysis of localization transition for scalar waves in a three-dimensional ensemble of resonant point scatterers. **Physical Review B**, v. 94, n. 6, p. 064202, 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.94.064202. Disponível em: <https://journals.aps.org/prb/pdf/

10.1103/PhysRevB.94.064202>. Acesso em: 11 jun. 2017.

IC34

Análise estrutural e funcional das principais xilanases identificadas nos estudos de proteômica da bactéria termofílica e lignocelulolítica, Thermogemmatispora T81

NAKADA, P. J. T.[1]; TOMAZINI JÚNIOR, A.[1]

paulinho.nakada@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é caracterizar as xilanases termofílicas selecionadas a partir da proteômica do organismo *Thermogemmatispora sp.* T81. Dentre as proteínas identificadas com dados do proteoma, foram selecionadas três construções para caracterização: GH30_7 (T81_30480); domínio catalítico da GH30_7 (T81_30480_domínio catalítico) e domínio CBM2 (T81_30480_domínio CBM2). Essas construções gênicas foram obtidas seguindo as seguintes etapas: seleção do gene alvo, amplificação pelo método da reação em cadeia da polimerase (PCR), inserção de cada gene alvo no vetor pET Trx-1a/Lic e replicação gênica em células de *E. coli* DH10B, passando para o processo de expressão heteróloga em *E. coli* Rosetta (DE3) pLysS. Em seguida, cada construção passou pelo processo de purificação proteica utilizando dois métodos cromatográficos: por afinidade (Ni^{2+}NTA *Superflow* (*Qiagen*)) e por exclusão molecular (*HiLoad 16/600 Superdex 75* (*GE Healthcare*)). As etapas da purificação proteica foram avaliadas em gel SDS-PAGE 15% e quantificadas utilizando o espectrofotômetro *NanoDrop® 2000* (*Thermo Scientific*). As três construções foram submetidas a ensaios enzimáticos para identificar as melhores condições bioquímicas (temperatura e pH) e substrato específico. Para a GH30_7, realizou-se os seguintes estudos: gel nativo e ensaio fluorimétrico. A partir dos procedimentos de purificação proteica descritos obtivemos um rendimento médio por litro de cultura de 78, 21 e 8 mg, respectivamente, para GH30_7, domínio catalítico e CBM2. A partir da caracterização bioquímica foi obtido que o melhor substrato de atuação para as construções em estudo foi o xilano de Faia, que é composto por resíduos de xilopiranoses unidos por ligações β-1,4-xilosídica. (1) A partir da caracterização bioquímica foi determinado que as condições ótimas de atividade para GH30_7 foram 70 °C e pH 5,0, e para o domínio catalítico separado foram 65 °C e pH 5,0. A eletroforese em gel nativo mostrou que o estado oligomérico da proteína GH30_7 é dímero e a partir do experimento de fluorescência intrínseca, evidenciou-se maior exposição de resíduos de triptofanos ao solvente. De acordo com os resultados obtidos, nota-se que a enzima em estudo tem especificidade para os substratos da hemicelulose com melhor atividade sobre o xilano de Faia. A proteína forma dímeros em solução e tem condições ótimas para sua atividade enzimática de 70 °C e pH 5,0, enquanto o domínio catalítico desta enzima apresenta uma temperatura ótima um pouco menor de 65 °C.

Palavras-chave: Thermogemmatispora. Xilanase. Heterologa.

Referências:

1 KIM, J. Y. et al. In planta production and characterization of a hyperthermostable GH10 xylanase in transgenic sugarcane. **Plant Molecular Biology,** v. 93, n. 4 - 5, p. 465-478, 2017.

IC35

Influência da esfingomielina na permeabilidade do fármaco cloridrato de gencitabina nos modelos de membrana

NASCIMENTO, G. F. do[1]; MATERÓN, E. M.[1,2]; FARIA, R. C.[2]; SHIMIZU, F. M.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de[1]

gustavo.nascimento@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Um dos grandes desafios para combater o câncer, uma das principais causas de morte no mundo, (1) é vencer a resistência intrínseca e adquirida aos fármacos citotóxicos. Há vários mecanismos de resistência a drogas antitumorais, sendo portanto essencial identificar os mais prováveis para um determinado fármaco. Neste estudo, investigamos a origem da quimiorresistência do cloridratro de gencitabina, usado para tratar câncer de pâncreas. A taxa de sobrevivência para pacientes desse tipo de câncer é menor que 5% devido à resistência criada pelas células cancerosas. Empregamos monocamadas de Langmuir para mimetizar uma membrana celular, com os quais foram estudadas as interações membrana-fármaco, principalmente nos efeitos sobre as proteínas associadas à resistência. Os filmes foram obtidos com os fosfolipídios fosfatidilcolina de dipalmitoíla (DPPC) e glicero-fosfoserina de dipalmitoíla (DPPS) e o lipídio esfingomielina (SM), além de misturas desses compostos. A esfingomielina é relevante por sua função como sinalizador celular, regulação de crescimento celular, transporte de fármacos, sobrevivência das células, sendo particularmente importante nos processos inflamatórios do câncer. (2) As interações foram caracterizadas empregando as técnicas de espectroscopia no infravermelho por reflexão e absorção com polarização modulada (PM-IRRAS) e microscopia no ângulo de Brewster (BAM). Observou-se influência significativa da esfingomielina sobre a membrana mimetizada na interação do fármaco cloridrato de gencitabina, o que servirá como base para estudos comparativos com células cancerosas.

Palavras-chave: Resistência. Langmuir. Gencitabina.

Referências:

1 CAVALCANTE, L S.; MONTEIRO, G. Gemcitabine: metabolism and molecular mechanisms of action, sensitivity and chemoresistance in pancreatic cancer. **European Journal of Pharmacology**, v. 741, p. 8-16, 2014. doi: 10.1016/j.ejphar.2014.07.041.

2 OGRETMEN, B. Sphingolipids in cancer: regulation of pathogenesis and therapy. **FEBS Letters**, v. 580, n. 23, p. 5467-5476, 2006.

IC36

Uso de técnicas de mineração de dados e espectroscopia de imagem para detecção de doenças em citros

NEVES, R. F. de O.[1]; WETTERICH, C. B.[3]; SOUSA, E. P. M. de[2]; MARCASSA, L. G.[1]

rfo.neves@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

[3] Instituto Federal do Norte de Minas Gerais - IFNMG

Objetivos: O mercado do cultivo de citros vem crescendo cada vez mais nos últimos anos, novas tecnologias para detecção e reconhecimento de doenças se tornam cada vez mais necessárias. Com isso buscamos desenvolver um método que conseguisse ser rápido, barato e eficaz na detecção de pragas letais à lavoura como, por exemplo, o *greening* (1) em amostras coletadas no estado da Flórida por meio da técnica de espectroscopia de imagem de fluorescência (1) combinada a algoritmos de mineração de dados. (2) Métodos e Procedimentos: Foi montado um sistema constituído de uma roda de filtros passa-banda. (1) LEDs para excitação em diferentes comprimentos de ondas, e uma câmera científica para realizar aquisição de imagens de plantas com sintomas. (1) Estas imagens foram submetidas a algoritmos de classificação baseados em *Support Vector Machines* (SVM) e Redes Neurais Artificiais (ANN) (2), buscando a melhor configuração de seus parâmetros por meio de testes de força bruta. Os resultados obtidos foram validados por meio do método 10-*fold cross validation* (2) tomando como base os parâmetros acurácia, sensibilidade e especificidade. (2) Resultados: Os resultados foram bastante significantes, com precisões em torno de 92% tanto para as Redes Neurais quanto para as SVM. Os mesmos resultaram em um artigo publicado. (1) Conclusões: De fato, os resultados são bastante relevantes, uma vez que consegue apresentar resultados satisfatórios em apenas alguns segundos, tempo este muito reduzido em relação ao método bioquímico de reação em cadeia da polimerase (1) que é usado hoje (o qual pode levar até duas semanas).

Palavras-chave: Espectroscopia de fluorescencia. Mineração de dados. Redes neurais.

Referências:

1 WETTERICH, C. B. et al. Detection of Huanglongbing in Florida using fluorescence imaging spectroscopy and machine-learning methods. **Applied Optics**, v. 56,n.1 p.15-23,2017.

2 NISBET, R.; MINER, G.; ELDER, J. **Handbook of statistical analysis and data mining applications.** New York: Academic Press, 2009.

IC37

Influência da radiação ultravioleta no envelhecimento do cristalino humano e na formação da catarata relacionada à idade

NEVES, N. I. de S.[1]; CASTRO NETO, J. C. de[1]; MATOS, L. de[1]; SOUZA, R. F. S. de[1]

natane.neves@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O olho é o órgão que permite capturar imagens do ambiente ao nosso redor. O ato de enxergar depende tanto da iluminação deste ambiente como de ações das várias estruturas do globo ocular. Além da córnea e da retina, uma estrutura importante é o cristalino, que funciona como lente biconvexa. Assim como a córnea, a função do cristalino é a de refratar os raios de luz e focalizar na retina, onde se encontram os receptores ópticos que transmitem a informação para o cérebro. Contudo, qualquer anormalidade em uma ou mais dessas estruturas podem levar ao comprometimento visual, interferindo em nossa acuidade visual. (1) A catarata, por exemplo, é uma doença associada ao cristalino, cujo efeito é o aumento da opacidade da lente, provocando uma visão nublada dificultando a passagem da luz. Estudos indicam que um dos motivos mais comuns que contribui para a formação de catarata é a longa exposição aos raios ultravioleta (UV), porém ainda não se sabe o mecanismo de formação dessa doença. (2) Em busca do melhor entendimento sobre o efeito da radiação UV no cristalino, faz-se necessário a realização de mais pesquisas. Em vista disso realizamos um estudo da influência da radiação UV no envelhecimento do cristalino e na formação da catarata. Analisando possíveis mudanças na composição química e física de cristalinos suínos e bovinos *in vitro,* pós exposição à radiação UV (laser 524nm e lâmpada de mercúrio), através de técnicas como espectros de transmitância por Espectroscopia Raman e imagens por Microscopia Óptica e Microscopia Confocal de Fluorescência.

Palavras-chave: Catarata. Ultravioleta. Cristalino.

Referências:

1 TRUSCOTT, R.J. W. Human cataract: the mechanisms responsible; light and butterfly eyes. **International Journal of Biochemistry & Cell Biology**, v. 35, n. 11, p.1500-1504, 2003.

2 MACCARTY,.A.; TAYLOR, H.R. A review of the epidemiological evidence linking ultraviolet radiation and cataracts. In: HOCKWIN, O.et al.(Ed.) **Progress in lens and cataract research**, Switzerland: Reinhard Grug, 2002.p.21-31.

IC38

Caracterização óptica da permeabilidade da membrana de Candida albicans para Clorina (PDZ)

NIRO, C. M.[1]; CAFACE, R. A.[1]; GUIMARÃES, F. E. G..[1]

carolina.niro@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A terapia fotodinâmica (do inglês *photodynamic therapy* - PDT) tem sido bastante estudada principalmente como um método promissor para tratamento de câncer, além disso, estudos mostram que a PDT também pode ser muito eficaz para a inativação microbiana e tratamento de infecções. (1) O princípio de tal método é utilizar substâncias especiais, chamadas fotossensibilizadores, que são excitadas ao serem submetidas à irradiação de doses de luz em baixa intensidade ($\sim$ 50 J/cm^2) de determinado comprimento de onda. (1-2) Então, essas substâncias excitadas, ao interagirem com oxigênio, produzem espécies citotóxicas que causam a destruição celular. (1-2) Essas espécies citotóxicas podem ser produzidas por dois mecanismos: o mecanismo de tipo I, em que são produzidos íons radicais e espécies reativas de oxigênio; e o mecanismo de tipo II, em que são produzidos estados excitados de oxigênio singleto, sendo o tipo II o mais desejado devido à presença do oxigênio singleto. (1) Fotossensibilizador como a clorina, em especial o Photodithazine (PDZ), apresenta uma boa eficiência na descontaminação por *Candida albicans* e outros microrganismos (principalmente fungos e bactérias). *Candida albicans* é a levedura mais encontrada no corpo humano e pode causar doenças em pacientes com o sistema imune comprometido. Por isso, estudos para criar protocolos de aplicação de PDT nesse tipo de levedura tem ganhado bastante importância. (2) O PDZ é uma clorina preparada na Rússia, sendo hidrossolúvel e ideal para aplicações em meio fisiológico. Segundo estudos, este fotossensibilizador apresenta baixa toxicidade no escuro, e é eliminado rapidamente do organismo, apresenta absorção alta em comprimentos de onda maiores no visível ($\sim$ 660 nm), sendo considerado um fotossensibilizador bastante promissor para aplicação em PDT. (3) Em estudos prévios utilizando a técnica de microscopia confocal, observou-se que a internalização de Photodithazine em células de *Candida albicans* ocorreu de forma mais eficiente quando foi aplicado luz durante o processo de internalização. Neste projeto foi dado ênfase ao estudo da interação e incorporação do PDZ sob diferentes condições de pré-iluminação (iluminação seriada) durante o período de incubação para diferentes dosagens de fotossensibilizador e de luz. Trabalhos realizados no CEPOF (Centro de Pesquisa em Ótica e Fototônica em São Carlos – IFSC/USP) mostraram que doses inferiores de PDT ($<$5 J/cm^2) são insuficientes para matar o microrganismo, mas eficiente para induzir a internalização de fotossensibilizador nas células de estudo o que melhora a eficiência para descontaminação quando for aplicado a PDT. Paralelamente, foi desenvolvido protocolos iniciais que possibilitem a determinação da contagem de células do microrganismo e da concentração de fotossensibilizador por célula através de técnicas de espalhamento de luz e por microscopia confocal.

Palavras-chave: Optica. Candida albicans. Terapia fotodinâmica. Photodithazine.

Referências:

1 DEMIDOVA, T. N.; HAMBLING, M. R. Photodynamic therapy targeted to pathogens. **International Journal of Immunopathology and Pharmacology,** v. 17, n. 3, p. 245-254, 2004.

2 ROMANO, R. A. **Aumento a eficiência da inativação fotodinâmica pela incorporação de fotossensibilizador induzida por luz em *Candida Albicans***. 2016. 117p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.p.21-29.

3 CORREIA, J. C. **Fotodegradação do photodithazine e citotoxidade dos fotoprodutos formados após irradiação com laser**. 2006. 114p. Dissertação (Mestrado em Quimica Analítica) - Instituto de Quimica de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Paulo. 2006.p.35-38.

IC39

Efeito da mistura de íons alcalinos e alcalinos terrosos em vidros fosfatos

NOBRE, D. A.[1]; SCHNEIDER, J. F.[1, 2]

davi.nobre@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Center for Research, Technology and Education in Vitreous Materials - CeRTEV

Os vidros fosfatos têm diversas aplicações em diferentes áreas. Quando existem, neste material, espécies iônicas com características distintas, como valência e raio iônico, é observada uma redução na mobilidade iônica, mesmo para baixas concentrações de um dos íons, devido ao Efeito do Íon Misto (EIM). (1,2) Este estudo teve o intuito de avaliar a ocorrência deste efeito com o estado de mistura iônica, uma vez que a mobilidade iônica influencia uma série de propriedades dos vidros que permitem testar o EIM. Foram preparados vidros de composição $xCaO \cdot (0,5-x)Na_2O_5 \cdot 0,5P_2O_5$, $0 \leq x \leq 0,4$ a partir de fosfato de amônia e carbonatos de cálcio e sódio. Cada mistura dos reagentes foi submetida a diferentes patamares de temperatura para a ocorrência correta das etapas físicas e químicas do processo. Foram determinadas a densidade e o volume molar de cada vidro, a temperatura de transição vítrea e o desvio químico do ^{31}P com relação ao ácido fosfórico com experimentos, respectivamente, de densimetria, Calorimetria Diferencial de Varredura (DSC, da sigla em inglês) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Foi observada uma relação linear entre o volume molar e o desvio químico de ^{31}P de cada composto e a fração molar de cálcio (x), sendo que, para o primeiro parâmetro, a relação foi crescente, enquanto que, para o segundo, foi decrescente. A temperatura de transição vítrea apresentou um comportamento quase linear (crescente) em função da razão de substituição iônica $Ca/(Ca+Na)$, mas os dois únicos vidros que fugiram da tendência o fizeram, provavelmente, devido a temperaturas equivocadas utilizadas em uma das etapas da preparação. De modo geral, as hipóteses iniciais de que o volume molar e a temperatura de transição vítrea cresceriam com o aumento do potencial iônico médio, enquanto o desvio químico diminuiria (3), foram verificadas. A observação de que essas propriedades variam linearmente com a composição do material é importante e não trivial, fornecendo bons indícios para aplicações dos vidros fosfatos.

Palavras-chave: Vidros fosfatos. Efeito do íon misto. Ressonância magnética nuclear.

Referências:

1 SCHNEIDER, J.; TSUCHIDA, J.E.; ECKERT, H. CAtion size effects in mixed-ion metaphosphate glasses: structural characterization by multinuclear solid state NMR spectroscopy. **Physical Chemistry Chemical Physics, v.** 15, n.34,p.14328, 2013.

2 TSUCHIDA, J.E. et al. Cation distribuition and local order in mixed sodium metaphosphate glasses.**Journal of Physical Chemistry C**, v.116, n..46,p. 24449, 2012.doi:10.1021/jp308268h

3 BROWN, R. K. et al.Cation effects on 31P MAS chemical shifts of metaphosphate glasses. **Journal of American Ceramic Society**, v.74, n.7,p.1287-1290, **1991.**

IC40

Processamento de dados para análise biomecânica com sensor inercial em pacientes com Acidente Vascular Encefálico (AVE): inovação tecnológica para pessoas com disfunção física

OLIVEIRA, L. O. de[1]; CASARIN, R. L.[2]; PAOLILLO, F. R.[2]; CASTRO NETO, J. C. de[2]

lucas.orlandi.o@gmail.com

[1] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: o objetivo principal deste trabalho é desenvolver algoritmos computacionais que calculem diferentes características dos movimentos realizados por pacientes que sofreram Acidente Vascular Encefálico (AVE). (1) Métodos e Procedimentos: o desenvolvimento do trabalho foi dividido em duas etapas principais: (I) coleta de dados; (II) implementação do software para a extração das características dos movimentos. A etapa (I) foi realizada na Unidade de Terapia Fotodinâmica da Santa Casa de Misericórdia de São Carlos, e contou com 38 voluntários, sendo 19 deles com hemiplegia decorrente de AVE e os demais, sadios. Para a coleta dos dados, foi utilizado um sensor inercial desenvolvido pelo Grupo de Óptica do IFSC-USP/CARCI. De cada pessoa, foram coletados dados de quatro articulações: cotovelo, punho, joelho e tornozelo. O software implementado durante a etapa (II) foi desenvolvido em Matlab e é capaz de extrair as seguintes características dos movimentos: pontos de máximo, pontos de mínimo, amplitude, regularidade e simetria. Resultados: o software desenvolvido gera como saída valores numéricos, que representam as características dos movimentos. Conclusões: o software desenvolvido obteve resultadossatisfatórios, sendo capaz de extrair as medidas desejadas, mostrando diferenças significativas na funcionalidade do membro parético, comparado ao membro não-parético dos pacientes com AVE.

Palavras-chave: Processamento de sinais. Análise de dados. Pacientes com AVE.

Referências:

1 LEBEL, K. et al. Inertial measures of motion for clinical biomechanics: comparative assessment of accuracy under controlled conditions-effect of velocity. **PloS One**, v. 8, n. 11, p. e79945-1-e79945-9, 2013.

IC41

Otimização em objetos 3D para jogos educativos

OLIVEIRA, D. D. de[1]; FERNANDES, A. A. C.[2]; LIMA, J. F. R.[2]; GUIDO, R. V. C.[3]

daniel.david.oliveira@usp.br

[1] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

[2] Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos - CIBFar

[3] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Desenvolver modelos de objetos tridimensionais com baixa quantidade de polígonos (*Low-poly*) a fim de otimizar um jogo educativo em máquinas com baixo desempenho, melhorando a experiência do usuário. Métodos e Procedimentos: Realizar processamentos de objetos que compõem as cenas do jogo, utilizando um software de modelagem 3D (Blender), para transformar modelos "*High-poly*" em modelos "*Low-poly*". Resultados: O jogo X5CAD (nome provisório) é um projeto em que o nível de interação e jogabilidade visa imergir o jogador em situações em que ele possa obter informações sobre cinco doenças negligenciadas. Foram criados aproximadamente 100 objetos que compõem as diferentes cenas para criação de uma versão alpha do jogo. Esta versão foi apresentada em um evento onde os participantes puderam interagir com o jogo e manifestar suas opiniões sobre diversos pontos de vista (jogabilidade, qualidade e pedagógico). Neste teste o desempenho do jogo nos PCs ao executarem o jogo foi satisfatório e houve consenso em relação à qualidade e relevância do projeto por parte dos usuários. Conclusões: Concluímos que a melhoria de desempenho em jogos digitais educativos deve ser continuamente almejada,"É importante a compreensão de que a cultura digital propõe uma nova maneirade pensar e agir pedagogicamente"(1),considerando sempre a realidade do público alvo em relação ao acesso às novas tecnologias. O X5CAD tem este compromisso e pretende apresentar os conteúdos sobre algumas doenças negligenciadas de maneira atrativa e descontraída.

Palavras-chave: Otimização. Educação. Objetos 3D.

Referências:

1 OLIVEIRA, E. D. Tecnologia e educação. In: ENCONTRO DE PESQUISADORES DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM EDUCAÇÃO, 11., 2013, São Paulo. **Anais...** São Paulo: Pontifícia Universidade Católica de São Paulo, 2013. p. 1-11.

IC42

Caracterização de complexos proteína-proteína e proteína-tRNA

PEREIRA, M. L.[1]; SILVA, M. T. A. da[1]; THIEMANN, O. H.[1]

murilo.leao.pereira@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

As enzimas SCL (Tb427tmp.211.3850), selenocisteína liase, e SPS2 (TbSPS2), selenofosfato sintetase (1) atuam na maquinaria de síntese e reciclagem de selenocisteína de *Trypanosoma brucei*. A formação de um complexo estável entre elas foi demonstrado por experimentos prévios e, portanto, este será o foco de estudo deste projeto, usando técnicas biofísicas para caracterizá-lo.Purificou-se as proteínas, sendo necessário para SCL o carregamento com piridoxal fosfato (PLP), um cofator da proteína, a fim de garantir que todas as formas estivessem ativas. Fez-se análise em espectofotômetro de SCL para garantir que havia apenas sinal da forma ligada do PLP (422 nm), além de Espalhamento Dinâmico da Luz (DLS), Dicroísmo Circular (CD) e Thermofluor para uma caracterização inicial da amostra. Ainda se gerou um modelo computacional para SCL usando o I-TASSER. Em seguida, fez-se estudo da interação das duas proteínas por Espalhamento de Luz em Multi-Ângulo para Massa Molar e Tamanho (SEC-MALS) e por fluorescência.Após todo o processo de purificação, obteve-se SCL e SPS2 com aproximadamente 50 kDa e 44 kDa, tamanhos esperados, sendo que as análises tanto por Exclusão Molecular quanto por DLS mostraram que ambas proteínas são diméricas. SCL apresentou uma temperatura de *melting* de 51 °C e se mostrou enovelada pelo resultado de CD. Análises de SEC-MALS em diferentes proporcões de SCL e SPS2 apresentou um pico alto com massa de aproximadamente 190 kDa. Fazendo uso de um fluorímetro, com mistura de amostra das duas proteínas em diferentes estequiometrias e excitando o PLP, observou-se o decaimento do sinal de emissão deste conforme mais SPS2 estava em solução. O resultado de CD mostrou um perfil característico de proteína rica em alfa-hélice, o que corresponde ao visto no modelo computacional gerado e às análogas, o que sugere que a proteína se enovelou corretamente. O pico em SEC-MALS próximo de 190 kDa sugere que o complexo formado entre as proteínas é um dímero de dímeros. Ademais, o decaimento do sinal de emissão do PLP mostra que a ligação à SPS2 tampa o sítio desse cofator, indicando como seria feita a interação entre as proteínas.

Palavras-chave: Selenocisteína. T. brucei. Selênio.

Referências:

1 FAIM, L.M. **Estudos estruturais e funcionais da selenofosfato sintetase de *Trypanosoma brucei* e *Leishmania major***. 2014. 218 p.Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

IC43

Aprendizado de técnicas de simulação computacional em física de semicondutores

PEREIRA, R. D.[1]; SIPAHI, G. M.[1]

robertaduartepereira@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Aprender ferramentas e técnicas computacionais são extremamente importantes para simulações físicas. O objetivo da iniciação científica foi aprender o uso de linguagens computacionais assim como o uso de softwares de criação de gráficos, ambos essenciais para a pesquisa científica, além do estudo da teoria de Estado Sólido para a execução de simulações computacionais utilizando nanofios no material GaAs na fase Wurtzita (1), essas simulações também necessitaram do conhecimento de Mecânica Quântica como poço quânticos que é um paralelo com o potencial dentro dos nanofios. (2-3)

Palavras-chave: Simulação computacional. Física computacional. Nanofios.

Referências:

1 SIGNORELLO, G. et al. Inducing a direct-to-pseudodirect bandgap transition in wurtzite GaAs nanowires with uniaxial stress. **Nature Communications,** v.5, n.3655, 2014.doi: 10.1038/ncomms4655

2 EISBERG, R. **Quantum physics of atoms,molecules, solids, nuclei, and particles** 2nd ed. New York: John Wiley ¨"Sons, 1985.

3 GRIFFITS, D. **Mecânica quântica.** São Paulo: Editora Pearson.Education, 2011.

IC44

Precession: um software para criar experimentos simulados de ressonância magnética

PESSOA, V. H. de M.[1]; PIZETTA, D. C.[1]; PAIVA, F. F.[1]

victor.pessoa@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto tem como objetivo principal desenvolver e implementar um software de código aberto utilizando Python para simulação do fenômeno de ressonância magnética (RM) para fins didáticos (1-2) e acadêmicos, tendo em vista o planejamento de novos experimentos. Esse software deve possibilitar a simulação de experimentos de espectroscopia, relaxometria e imagens por RM, permitindo ao usuário simular todos os passos necessários desde a criação das amostras até obtenção de espectros e imagens por diferentes sequências de pulsos. Até o presente momento, já foram desenvolvidos os módulos responsáveis pelas configurações gerais do programa, tais quais intensidade do campo magnético aplicado, configurações da simulação e pela geração de uma amostra com características espaciais e magnéticas editáveis, incluindo sua visualização tridimensional. As funcionalidades do software a serem desenvolvidas incluem módulo responsável pela criação de sequências de pulsos, pela simulação dos sinais com auxílio da biblioteca desenvolvida em Python para a simulação das equações de Bloch (3) e pelo processamento de imagens.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Simulação. Software.

Referências:

1 HARGREAVES, B. **Bloch equation simulation**. Disponível em: <http://mrsrl.stanford.edu/~brian/bloch/>. Acesso em: 29 ago. 2017.

2 AMALKANTI, N. **Bloch-simulator-python**. 2014. Disponível em: <https://github.com/neji49/bloch-simulator-python>. Acesso em: 29 ago. 2017.

3 BOLDT, K. Simulating spin dynamics in NMR with a new computer program intended for education: insensitive. **Concepts in Magnetic Resonance**, v. 38A, n. 2, p. 17-24, 2011.

IC45

Investigando as concepções conceituais em física dos alunos de graduação do campus de São Carlos da USP

QUIBAO, M. P.[1]; ALMEIDA, N. S. de[1]; NAZARIO, N. R.[1]; SILVA, A. C.[1]; SILVA, R. M. A. A.[1]; MUNIZ, S. R.[1]; PAIVA, F. F.[1]

matheus.quibao@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Proposto em 1992 por Hestenes, Wells e Swackhammer (1), o FCI (*Force Concept Inventory*), ou ICF (Inventário dos Conceitos de Força), destina-se a analisar as concepções da Mecânica Newtoniana de alunos do Ensino Básico e Superior por meio de questões de múltipla escolha, elaboradas de maneira a confrontar as ideias do senso comum de fenômenos físicos do cotidiano. Utilizado em diferentes oportunidades por professores e pesquisadores preocupados com aprendizado conceitual dos estudantes de Ciências Básicas (2-3), o FCI pode ser aplicado com fim Diagnóstico (para identificar e classificar o perfil conceitual dos alunos), Avaliativo (comparar o impacto de diferentes cursos e metodologias), e de Colocação para turmas avançadas. O presente trabalho apresenta o resultado da aplicação do questionário FCI para alunos dos cursos de Bacharelado em Física, Bacharelado e Licenciatura em Matemática e Engenharias, oferecidos pelos institutos que compõem o *campus* de São Carlos da Universidade de São Paulo, e que se encontram matriculados em disciplinas equivalentes a Física I. A aplicação do questionário se dá em um momento em que as grades curriculares e ementas dos cursos e disciplinas oferecidos pelo Instituto de Física de São Carlos (IFSC) passaram por recentes reformulações, sendo a principal delas o reconhecimento de que os alunos devem ter papel fundamentalmente ativo durante o processo de aprendizagem, indo de encontro com as mais recentes pesquisas na área da Educação em Ciências. Em momento inicial, alguns institutos responsáveis por cursos de graduação do campus optaram por não fazer parte desta implementação, continuando a oferecer as disciplinas de Física I por meio de metodologias expositivas, ou tradicionais. Com o intuito de quantificar o ganho conceitual para os estudantes em diferentes metodologias, duas aplicações do questionário foram feitas, no começo e fim do primeiro semestre letivo de 2017, a primeira logo no primeiro dia de aula anterior ao início da disciplina e a segunda aplicação próxima ao fim dos cursos em acordo com a agenda dos professores participantes da pesquisa. Por fim, com os resultados em mãos e utilizando-nos de análises estatísticas, estudamos os resultados dentro das diferentes turmas e cursos de ingresso, comparando-os com os dados internacionais da aplicação do FCI e pudemos confirmar que turmas envolvidas com metodologias ativas apresentam maior ganho conceitual ao fim do curso, resultados estes que concordam com o que é previsto na literatura. Perspectivas futuras incluem tentar compreender de maneira mais abrangente a real eficiência do atual mecanismo de avaliação através da análise de correlação entre ganho conceitual e nota final de cada um dos alunos avaliados.

Palavras-chave: Ensino. Física. FCI.

Referências:

1 HESTENES, D.; WELLS, M.; SWACKHAMER, G. Force concept inventory. **Physics Teacher**, v. 30, n. 3, p. 141-158, 1992.

2 HAKE, R. R. Interactive-engagement versus traditional methods: a six-thousand-student survey of mechanics test data for introductory physics courses. **American Journal of Physics**, v. 66, n. 1, p. 64-74, 1998.

3 BARROS, J. A. et al. Engajamento interativo no curso de Física I da UFJF. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 26, n. 1, p. 63-69, 2004.

IC46

Desenvolvimento e caracterização de nanocápsulas de protoporfirina IX para aplicação em nanomedicina associada à terapia fotodinâmica

REYES, G. M.[1,2]; BERNARDI, J. C.[2]

gmayrreyes@gmail.com

[1] Instituto de Química de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: O presente trabalho teve como objetivo a otimização das condições de Terapia Fotodinâmica (TFD) empregando lipossomos fundíveis com a membrana celular (MFL) contendo o fotossensibilizador (FS) protoporfirina IX (PP IX) de forma a comparar a atividade fotodinâmica da molécula livre e desta nanoencapsulada; Métodos e Procedimentos: Primeiramente, otimizou-se o encapsulamento da PP IX (*Ophthalmos*) na forma de MFL (DMPC:PEG:DOTAP 72,5:15,2:19,6, *Avanti Polar Lipids, Inc.*) pela análise de melhores condições de estocagem, concentração dos FS e limpeza dos MFL por diálise. Tais estudos se basearam na caracterização óptica e espectroscópica dos MFL com e sem o FS. (1) Após garantir a estrutura e estabilidade dos MFL, otimizou-se as condições da TFD com ensaios *in vitro* em linhagem celular cancerosa HTC, determinando tempo ótimo de fusão dos MFL com a membrana celular e potência ótima da radiação eletromagnética a ser aplicada, empregando-se análise de viabilidade celular MTT e de Espécies Reativas de Oxigênio (ROS) em conjunto com técnicas espectroscópicas; Resultados: A incorporação do FS no MFL foi eficiente, pois houve alteração no tamanho, potencial zeta e absorção na região UV-vis dos MFL com e sem os FS. A análise de diálise evidenciou que os MFL são puros e não necessitam de etapa de limpeza. Por fim, os ensaios *in vitro* mostraram que o sistema nanoencapsulado de MFL-PP IX funde na membrana celular no período de 4 horas. A potência ótima da luz com 630 nm a ser empregada na TFD foi definida como 25 J cm-2 para os MFL-PP IX. A mortalidade celular foi causada pela simbiose do FS com a luz, já que esses fatores isolados não causaram a inviabilização significativa das células, sendo tal mortalidade possivelmente provocada pela geração de ROS; Conclusões: O presente estudo demonstrou que o MFL-PP IX se mostrou eficiente para aplicação em terapia fotodinâmica com tempos de incubação de 4 horas e aplicação de luz com 630 nm e potência de 25 J cm-2 .

Palavras-chave: Lipossomos. Protoporfirina IX. Terapia fotodinâmica.

Referências:

1 CANCINO, J.; MARANGONI, V. N.; ZUCOLOTTO, V. Nanotecnologia em medicina: aspectos fundamentais e principais preocupações. **Química Nova**, v.37, n.3, p. 521-526,2014.

IC47

Fluorescência dos produtos finais de glicação avançada (AGEs) em pacientes com Acidente Vascular Encefálico (AVE)

RIBEIRO, O. R.[1]; PAOLILLO, F. R.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; CASTRO NETO, J. C. de[1]

oscar.ribeirof@gmail.com

[1] Instituto de Fisica de São Carlos - USP

Os produtos finais de glicação avançada (AGEs) referem-se a glicação não enzimática de proteínas, lipídios ou ácidos nucléicos formados durante a vida normal. No entanto, o acúmulo acelerado de AGEs pode ocorrer devido ao aumento do estresse oxidativo e glicêmico como demonstrado em. (1) A espectroscopia de fluorescência pode proporcionar oportunidades de diagnóstico à baixo custo como observado em (2), com portabilidade e possibilidade de uma resposta em tempo real usando um método de investigação não invasivo e não destrutivo. O objetivo deste estudo foi investigar a autofluorescência dos AGEs em voluntários com e sem Acidente Vascular Encefálico (AVE). Foi utilizado um espectrômetro de fluorescência (AGE Reader, DiagnOptics Technologies B.V., Holanda) com LEDs opera no intervalo de 300 à 600 nm. O antebraço foi limpo com álcool e, posteriormente, posicionado no espectrômetro para avaliação dos AGEs na pele. A autofluorescência da pele foi significativamente maior em pacientes com AVE e diabetes em comparação com os indivíduos saudáveis ($p<0,05$).

Palavras-chave: Fluorescência. AVE. AGE.

Referências:

1 YAMAGISHI, S. Role of advanced glycation end products (AGEs) and receptor for AGEs (RAGE) in vascular damage in diabetes. **Experimental Gerontology,** v. 46, n. 4, p. 217-24, 2011.

2 KOLLIAS, N..; ZONIOS, G..; STAMATAS, G. Fluorescence spectroscopy of skin. **Vibrational Spectroscopy**, v.28, n. 1, p. 17-23, 2002..

IC48

Estudos estruturais do complexo SEPT 6G-2G

ROSA, H. V. D.[1]; ARAÚJO, A. P. U. de[1]

higor.rosa@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Septinas são proteínas que ligam o GTP e interagem entre si formando filamentos, os quais atuam em diversas funções celulares importantes. Muitos estudos já foram realizados para entender o mecanismo de interação entre as septinas para que ocorra a formação desses filamentos. Entretanto, há apenas um heterocomplexo estruturalmente caracterizado, formado pelas septinas 2-6-7 humanas (1), mas este apresenta baixa resolução e não permite análise de muitos detalhes estruturais necessários para entender a montagem dos heterocomplexos. Assim, neste estudo, analisamos a interface entre os domínios de ligação ao GTP (domínio G) do complexo de septinas 2-6 (SEPT6G-SEPT2G) para compreender os determinantes moleculares envolvidos nesta interação. Métodos e Procedimentos: As sequências codificantes dos domínios G das septinas humanas 2 e 6 foram subclonadas em plasmídeos permitindo sua coexpressão. O complexo foi purificado por cromatografia de afinidade de níquel, seguida por cromatografia exclusão molecular (SEC). O estado oligomérico e a dispersão da amostra foram analisados por espalhamento de luz dinâmico (DLS) e por SEC conectado a espalhamento de luz a múltiplos-ângulos (SEC-MALS). A estrutura secundária foi analisada por dicroísmo circular (CD), confirmando o enovelamento da proteína recombinante. A partir de ensaios de cristalização, realizados pela técnica de difusão de vapor por gota sentada, foram obtidos cristais, os quais foram difratados por raios-X e os dados coletados estão em fase de refinamento. Resultados: O complexo SEPT6G/SEPT2G foi coexpresso e copurificado quando analisado por SDS-PAGE. Por meio da cromatografia de exclusão molecular, foi possível separá-lo do excesso de monômero de SEPT6G e também verificar que o heterocomplexo se apresentava como dímero em solução. A análise por SEC-MALS mostrou um pico monodisperso que apresentava massa molecular de (68,9±4,6) kDa. Com a difração dos melhores cristais obtidos, obteve-se um mapa de densidade eletrônica a 3Å. A unidade assimétrica desse cristal foi um heterodímero, formado pelo heterocomplexo SEPT6G-SEPT2G. Não se observou a interação fisiológica (interface NC) entre as septinas 2. Supõe-se que outras regiões, além do domínio G da septina 2 (regiões N e/ou C terminais) sejam necessárias para a estabilização dessa interação. Novas construções contendo essas regiões estão sendo produzidas para verificar a hipótese. Conclusões: Cristais para o heterocomplexo foram obtidos e difratados por raios-x, estando em fase de refinamento. Quando finalizada, esta será a primeira estrutura de um heterocomplexo de septinas com resolução que permitirá esclarecer características estruturais importantes da interface de dimerização em um heterocomplexo.

Palavras-chave: Septina. Interação proteína-proteína. GTPases.

Referências:

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

IC49

Desenvolvimento de um sistema de estabilização de lasers pelo método Pound-Drever-Hall

SANTOS, B. N.[1]; HENN, E. A. de L.[1]

bruno.nicolau.santos@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Nesse projeto, temos como objetivo aplicar o método Pound-Drever-Hall (1) para estabilização de um laser sintonizável e, para isso, utilizaremos uma cavidade óptica de Fabry-Perot, a qual será utilizada para medir as possíveis flutuações na frequência. O método descreve um modelo óptico-eletrônico de retroalimentação que modula o feixe do laser através de um cristal e gera um sinal de erro com um circuito relativamente simples. (2) A teoria que explica tal técnica requer o entendimento dos feixes gaussianos (3), que nos possibilita uma análise mais detalhada sobre a cavidade e, também, um estudo análitico e quantitativo do circuito de retroalimentação e, especificamente, do método de modulação. Por fim, o feixe estabilizado será utilizado em um desacelerador Zeeman, que está integrado a um sistema de resfriamento atômico. O interesse por tal sistema está no estudo de gases quânticos dipolares, em especial o disprósio, um dos elementos mais cobiçados para esse objetivo por possuir uma alta magnetização.

Palavras-chave: Estabilização. Laser. Frequência.

Referências:

1 DREVER,. J. L.et al. Laser phase and frequency stabilization using an optical resonator. **Applied Physics B**, v.31, n.2,p.97–105, 1983.

2 BLACK,E. D. An introduction to pound–drever–hall laser frequency stabilization. **American Journal of Physics**, v.69, n.1,p.79–87, 2001.

3 NAGOURNEY, W. **Quantum electronics for atomic physics and telecommunication**. 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, 2014.

IC50

Síntese e eletrocristalização de nanotubos de dióxido de titânio

SANTOS, L. F. L. S.[1]; GONÇALVES, R. V.[2]; M'PEKO, J. C.[2]

leonardo.felipe.santos@usp.br

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

A síntese anódica de nanotubos de óxidos semicondutores como TiO_2 tem sido intensamente explorada devido ao potencial de aplicação em diferentes áreas como bioengenharia (1), geração de energia renovável (2), abatimento de gases tóxicos, entre outras. Existem vários parâmetros que podem ser ajustados na síntese anódica tais como: temperatura, composição química do eletrólito, tensão e distância entre os eletrodos. Estes parâmteros podem levar à obtenção de nanotubos com diferentes comprimentos e diâmetros, aderidos ao substrato metálico ou em forma de pó. (1-3) Neste projeto o ambiente reacional do eletrólito foi minuciosamente controlado a fim de obtermos nanotubos de TiO_2 (TiO_2 NTs) realmente aderidos ao substrato de Ti. Esta condição é muito importante para o estudo da eletrocristalização assistida por um campo elétrico, pois o substrato metálico é usado como um dos eletrodos e a matriz de nanotubos é predominantemente mantida paralela ao campo elétrico, permitindo analisar a possível influência da direção do campo sob a nano-estrutura organizada. As análises preliminares de difração de raios X (DRX) confirmaram a presença da fase cristalina Anatase nos nanotubos de TiO_2 cristalizados sob a ação de um campo elétrico a baixas temperaturas: 265 °C sob 30 V, quando comparados com o processo de cristalização convencional utilizando forno, que necessita temperaturas entre 300 °C e 500 °C. Microscopia eletrônica de varredura foi usada para caracterizar a morfologia dos nanotubos e visualizar o crescimento de grãos.

Palavras-chave: Nanotubos. TiO2. Anatase.

Referências:

1 DONGLIANG, Y. et al. Facile method to enhance the adhesion of TiO2 nanotube arrays to Ti substrate. **ACS Applied Materials Interfaces**, v. 6, n. 11, p. 8001-8005, 2014.

2 ROY, P.; BERGER, S.; SCHMUKI, P. TiO2 nanotubes: synthesis and applications. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 50, n. 13, p. 2904-2939, 2011.

3 SEULGI, S. et al. Robust free standing flow-through TiO2 nanotube membranes of pure anatase. **Electrochemistry Communications**, v. 71, p. 73-78, 2016. doi: 10.1016/j.elecom.2016.08.010.

IC51

Caracterização de madeiras modificadas com extratos de pimentas como preservantes naturais

SANTOS, M. H.[1]; GONÇALVES, D.[2]

matheus2.santos@usp.br

[1] Instituto de Química de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Este trabalho apresenta uma investigação sobre as variações na molhabilidade e no aspecto visual das superfícies de madeiras após tratamento com oleoresinas de capsicum, ricos em capsaicina. (1) Com estes resultados, pode-se avaliar a aplicabilidade deste produto como preservativo natural de madeira. Métodos: Para a obtenção das oleoresinas de capsicum foram utilizadas duas espécies de pimenta, Trinidad Scorpion e Bhut Jolokia. A extração das oleoresinas foi realizada em ultrassom segundo adaptações de metodologia da literatura. (2) Os extratos foram aplicados sobre corpos de prova de duas espécies de madeira, *Pinus Elliottii* e um clone de Eucalipto, Amaru. Além das oleoresinas de capsicum foi realizado um tratamento com um preservativo sintético comercial (Stain) para efeito de comparação. Para a medida da variação do aspecto visual das superfícies das madeiras foi utilizado um colorímetro posicionado no centro do corpo de prova. Já a determinação das molhabilidades das superfícies das madeiras antes e depois das modificações com os preservantes foi realizada com a medição dos ângulos de contato. Para tanto, foi utilizado o método de gota séssil com quatro líquidos de prova com diferentes polaridades (água, diiodometano, formamida e etilenoglicol). Resultados: Foi possível observar a variação de cor após a aplicação dos extratos de pimenta assim como Stain em ambas as espécies de madeira. Considerando os ângulos de contato, pôde-se observar que o extrato de pimenta aumentou a molhabilidade para os líquidos polares e diminuiu para líquidos apolares. Conclusões: Os resultados demonstraram que as oleoresinas de capsicum apresentaram uma interação mais compleza com as superfícies das madeiras e que pode ter uma relação com o método de obtenção dos extratos, concentração e grau de pungência. Assim, é possível que o extrato não estivesse concentrado em capsaicina, sendo necessário propor métodos de caracterização e quantificação do extrato obtido além de diferentes métodos de extração.

Palavras-chave: Pimenta. Capsaicina. Preservante natural.

Referências:

1 ZILIO, A.C. **Oleoresina de capsaicina como preservante natural de madeira de Pinus sp. contra a ação de fungos de podridão branca e de podridão mole**.2015. 103p. Tese (Doutorado em Engenharia de Materiais) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

2 BARBERO, G. F. Ultrasound-assisted extraction of capsaicinoids from peppers. **Talanta** v. 75, n.5,

p. 1332-1337, 2008.

IC52

Avaliação e caracterização de misturas de fotossensibilizadores para otimização de tratamentos de terapia fotodinâmica.

SANTOS, N. F.[1]; ROMANO, R. A.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

nata.santos@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Caracterizar mistura de fotossensibilizadores utilizando técnicas de espectroscopia de absorção, fluorescência, fotodegradação e tempo de meia vida da solução em água. Realizar análises de fotooxidação para avaliar os possíveis ganhos em relação aos fotossensibilizadores puros, para futuramente aplicá-los a terapia fotodinâmica. Fotossensibilizadores são substâncias que ao reagir com a luz são capazes de gerar subprodutos altamente reativos, esta propriedade vem sendo utilizado em tratamento de resíduos, esterilização de alimentos, inativação de agentes patogênicos no sangue e no tratamento de câncer por meio da terapia fotodinâmica. (1) Diversos fotossensibilizadores são conhecidos e comercializados, cada um com suas características e propriedades bem definidas. (2) Segundo o Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva (INCA - 2016) o câncer de pele não melanoma é o mais frequente no Brasil correspondendo a 30% dos casos. (3) Este tipo de caso por exemplo é tratado por terapia fotodinâmica, com a otimização deste processo torna-se possível melhorar o tratamento diminuindo o tempo e o número de doses necessárias para curar o paciente.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Caracterização. Fotossensibilizadores. Mistura de fotossensibilizadores. Photogem. Clorina.

Referências:

1 ROMANO, R. A. **Aumento da eficiência da inativação fotodinâmica pela incorporação de fotossensibilizador indizuda por luz em Candida albicans**. 2016. 117 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

2 MACHADO, A. E. **T**erapia fotodinâmica: princípios, potencial de aplicação e perspectivas. **Quimica Nova**, v.23, n.2, p.237-243, 2000.

3 INCA. Instituto Nacional de Câncer José de Alencar Gomes da Silva. **Pele não melanoma**. Disponível em: <http://www2.inca.gov.br/wps/wcm/connect/tiposdecancer/site/home/pele_nao_melanoma>. Acesso em: 30 ago. 2017.

IC53

Caracterização de novos moduladores de microtúbulos com propriedades anticâncer

SILVA, E. M. G.[1]; MARTINS, C. T.[1]; MAGALHÃES, L. G.[1]; RUSSOWSKY, D.[2]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

ellen.giliotti.silva@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS.

As células cancerosas se tornam diferenciadas devido as alterações que acontecem em seu material genético. Estas alterações envolvem uma complexa rede de vias bioquímicas, que são estudadas como possíveis alvos para ações terapêuticas, como a proteína tubulina. (1) Os microtúbulos são polímeros constituídos por dímeros de α e β tubulina e desempenham papéis essenciais, como a migração e divisão celular, por meio da polimerização e despolimerização da mesma. (2) O objetivo desse projeto é a identificação de novos compostos com atividade moduladora da tubulina a partir de três séries químicas: (i) híbridos de dihidropirimidinona-chalconas, (ii) chalconas e (iii) diidropirimidinonas. Para tanto, a seleção de novos compostos moduladores da tubulina será feita por meio de métodos computacionais e experimentais: Triagem em ensaios celulares e bioquímicos e determinação da potência dos *hits* identificados; Modelagem molecular e proposição de novos análogos visando à otimização da atividade biológica; Avaliação dos efeitos celulares específicos para elucidação do mecanismo de ação por meio de técnicas como a citometria de fluxo. Identificou-se híbridos de dihidropirimidinona-chalconas e chalconas que possuem mecanismo de ação semelhante ao do fármaco paclitaxel, por meio de ensaios bioquímicos de polimerização da proteína tubulina. Estes compostos também foram avaliados por meio de ensaios celulares, que fazem parte de um projeto complementar, e se mostraram citotóxicos contra a linhagem tumoral MDA-MB-231 com valores de CC50 entre 1 – 10uM. Considerando o conjunto de ensaios realizados até o momento, os compostos mais promissores são as chalconas (EB83, EB92, EB97, EB99) e o híbrido EB106, devido a interação que tiveram com os microtúbulos, exibindo um comportamento semelhante ao do paclitaxel, estabilizando os microtúbulos. As dihidropirimidinonas (EB67 E ML018) e o híbrido ML031 foram inativos no modelo de citotoxicidade. A determinação da potência dos compostos e a avaliação do ciclo celular para a elucidação do mecanismo de ação dos compostos estão em andamento.

Palavras-chave: Câncer. Tubulina. Microtúbulos.

Referências:

1 MAGALHAES, L. G.; ANDRICOPULO, A. D. **Identificação e caracterização de novos agentes com propriedades anticâncer.** 2014. 120p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

2 DUMONTET, C. et al.Microtubule-binding agents: a dynamic field of cancer therapeutics. **National**

Reviews Drug Discovery. v.9, n.10, p.790–803,2010.

IC54

Síntese e caracterização de materiais semicondutores nanoestruturados luminescentes à base de CaAl2O4

SILVA, G. M. R. da[1]; MESQUITA, A.[1]

gabriela.mrodrigues@live.com

[1] Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho" - UNESP

Os materiais nanoestruturados vêm sendo atualmente estudados por proporcionar um melhor entendimento de aspectos físicos e químicos que causam mudanças em suas propriedades e que possibilitam várias aplicações tecnológicas. Estudos da estrutura de materiais semicondutores em escala nanométrica estão recebendo certo interesse por causa do tamanho quântico que expressam. (1) Os semicondutores nanocristalinos expõem certas propriedades eletrônicas e eles são objeto de pesquisa, pois exibem uma vasta diversidade de aplicações quando estão na escala nanométrica. (1) O material aluminato de cálcio, seja puro ou dopado com terras raras, tem sido alvo de atenção por apresentar propriedades que são fundamentais, variabilidade e grande potencial para aplicações tecnológicas. (1) Na literatura, não existe concordância a respeito da emissão de fotoluminescência nesses materiais. (2) Amostras CaAl2O4:Mn foram preparadas pelo método dos precursores poliméricos com êxito. Resultados com a técnica de difração de raios X mostraram a formação da fase hexagonal do aluminato de cálcio sem a presença de fases secundárias. É observada uma emissão larga centrada em 440 nm no espectro de fotoluminescência das amostras pura, cuja intensidade diminui à medida que se aumenta a concentração de Mn.

Palavras-chave: Nanopartículas. Semicondutores. Aluminato de cálcio.

Referências:

1 CALLISTER JUNIOR, W. D.; RETHWISCH, D. G. **Ciência e engenharia de materiais:** uma introdução. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

2 LONGO, V. M. et al. Strong violet-blue light photoluminescence emission at room temperature in SrZrO3: joint experimental and theoretical study. **Acta Materialia**, v. 56, n. 10, p. 2191-2202, 2008.

IC55

Aprimoramento de um ambiente integrado de desenvolvimento e de um framework para ressonância magnética

SILVA, L. de C. R. da[1]; PIZETTA, D. C.[1]

lucas.carvalho.silva@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O principal objetivo deste trabalho é dar continuidade para o PyMR, com o objetivo de implementar funcionalidades auxiliares descritas em (1) que envolvam, principalmente, a interface gráfica de edição de objetos: incorporação do Spyder na versão de desenvolvimento do PyMR, Atualização da aba de parâmetros existente no ToRM-IDE e incorporação da mesma para o PyMR. O desenvolvimento deste trabalho foi realizado com o uso de Python na versão 3.4 com compatibilidade com Python 2.7, juntamente com a biblioteca PySide, PyQtGraph e NumPy. O desenvolvimento seguiu a metodologia ágil Scrum. O Object Manager do PyMR foi reestruturado (2) de modo a suportar as alterações no core do PyMR, o Spyder foi integrado à essa atualização, também foi implementada uma nova aba de parâmetros. Este trabalho cumpriu com seus objetivos de ampliação do framework PyMR, com a adição da biblioteca Spyder e também com a criação da nova aba de visualização de parâmetros, tornando assim a visualização das propriedades de todos os objetos do PyMR mais dinâmica e funcional.

Palavras-chave: Ressonância Magnética. Framework. Ambiente integrado.

Referências:

1 PIZETTA,D. C. **Biblioteca, API e IDE para o desenvolvimento de projetos de metodologias de Ressonância Magnética**. 2014. 93p. Dissertação(Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos,Universidade de São Paulo, São Carlos,2014.

2 PIZETTA, D. C. PyMR - um framework generalizado para programação de sistemas de ressonância magnética. In: SEMANA INTEGRADA DO INSTITUTO DE FISICA DE SÃO CARLOS, SIFSC,2016,São Carlos. **Anais**...São Carlos: IFSC, 2016.PG156.

IC56

Construção de um microscópio confocal para estudo de centros NV em diamante e pinças ópticas - explorando novas tecnologias quânticas

SILVA, P. F.[1]; SEGURA, C. O. O.[1]; MUNIZ, S. R.[1]

pedro.faleiros.silva@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP.

Os centros nitrogênio vacância (NV) são defeitos na estrutura do diamante que proporcionam a possibilidade de controle quântico de um único spin eletrônico, mesmo a temperatura ambiente. (1,2) Neste trabalho são apresentados desenvolvimentos visando explorar esse sistema no contexto das tecnologias quânticas. Particularmente, é descrito um microscópio confocal versátil, de fácil construção, que permite a caracterização da fluorescência desses centros. A montagem foi inspirada em modelos descritos na literatura, porém otimizada para nossos objetivos, priorizando um aparato modular simples e versátil, que permite explorar outras aplicações e pesquisas, como a produção de uma pinça óptica para nanopartículas. (3) Apesar de estarmos no começo das pesquisas nestas novas áreas, avanços importantes foram alcançados na caracterização e controle desses sistemas de grande interesse prático, como a detecção da fluorescência desses centros através de nosso setup. No pôster serão apresentados esses avanços e os próximos passos do projeto. Em particular, um dos próximos objetivos é a detecção óptica da ressonância magnética dos centros NV individuais, combinando técnicas ópticas e espectroscopia de micro-ondas.

Palavras-chave: Centros NV em diamante. Diamante. Tecnologias quânticas. Pinças ópticas. Computação quântica.

Referências:

1 ACOSTA, V.; HEMMER, P. Nitrogen vacancy centers: physics and applications. **MRS Bulletin**, v. 38, n.2, p.127-130, 2013.

2 GORDON,L. et al. Quantum computing with defects. **MRS Bulletin**, v. 38, p.802-807,2013. doi:10.1557/mrs.2013.206.

3 MARAGO, O. M. et al. Optical trapping and manipulation of nanostructures. Optical trapping and manipulation of nanostructures. **Nature Nanotechnology**, v. 8, p.807–819,2013. doi:10.1038/nnano.2013.208.

IC57

Desenvolvimento de uma fonte versátil de radiofrequência e micro-ondas

SILVA, R. A. de S.[1]; SEGURA, C. O. O.[2]; MUNIZ, S. R.[2]

raul.sousa.silva@usp.br

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho foi desenvolvido com o propósito de se construir uma fonte versátil de radiofrequência e micro-ondas, que permitisse ser precisa, compacta, de fácil e rápida modulação, além de ter baixo custo para uso em múltiplas aplicações num laboratório de tecnologias quânticas, visando especialmente experimentos com centros NV em diamantes e átomos ultrafrios aprisionados. Para construir esta fonte, foi utilizando o método de síntese direta digital (DDS) (1), a partir do chip AD9910. (2) Foram construídos também alguns circuitos de alimentação e interface para o sistema final, e os primeiros testes de geração de sinal foram executados, tanto na DDS como em um gerador de micro-ondas comercial disponível no laboratório, para comparação. Tendo os primeiros resultados em mãos, o passo seguinte foi o estudo de operação de misturadores de RF e dimensionamento do equipamento necessário para a construção do sistema final. Por fim, um refinamento do projeto, passando o controle da DDS para um microcontrolador dedicado, foi avaliado e os primeiros testes foram executados, estando esta última etapa em fase de construção, neste momento. Os primeiros testes realizados com a DDS indicaram que os sinais possuem boas características de amplitude e largura de banda (suficientemente estreita), indicando também boa precisão, rapidez na resposta e imunidade do sinal à ruídos externos. Um teste semelhante executado com o gerador de micro-ondas mostrou que a qualidade do sinal da DDS é bastante razoável e adequadas para as aplicações pretendidas. (3) O trabalho desenvolvido, apesar de ainda não estar totalmente concluído, por falta de alguns componentes (misturador de sinais adequado), mostrou-se bastante útil para a aplicações gerais em laboratórios de pesquisa semelhantes. O equipamento final será bastante versátil, flexível e prático, especialmente após integração com o microcontrolador. Poderá ser facilmente adaptado para várias outras aplicações.

Palavras-chave: DDS. Microondas. Nanodiamantes.

Referências:

1 MURPHY, E. All about direct digital synthesis. **Analog Dialogue. v.**38, n.3, p.1-5,2004.

2 ANALOG DEVICESevices::AD 9910. Disponível em: <http://www.analog.com/media/en/technical-documentation/data-sheets/AD9910.pdf>. Acesso em: fev. 2017.

3 WINKLER, J. **Agile radio-frequency source for hyperfine manipulation of ultra-cold atoms.**2009. 45p. Thesis (Bachelors of Science) - College of William and Mary., WIlliamsburg,EUA,

2009.

IC58

Novas estratégias para inativação fotodinâmica de Staphylococcus aureus em sangue

SOARES, J. M.[1]; BLANCO, K. C.[1]

jennifer.soares@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos grandes desafios da medicina atual tem sido desenvolver tratamentos alternativos para microrganismos resistentes a antibióticos. Os principais casos de bacteremia são causados por patógenos resistentes tornando um caso de problema mundial. (1) A terapia fotodinâmica de inativação mostra-se como uma alternativa a descontaminação sanguínea por agir através de mecanismos fotoquímicos que impedem o desenvolvimento de resistência natural. (2) O intuito deste projeto foi otimizar os parâmetros da técnica para obter melhores resultados na descontaminação do sangue, visto que por ser um tecido complexo apresenta dificuldades no tratamento.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Descontaminação sanguinea. Bacteremia.

Referências:

1 PIETERSZ,R. et al. Bacterial contamination in platelet concentrates. **Vox Sanguinis**, v. 106, n. 3, p. 256-283, 2014.

2 HAMBLIN, M. R. Antimicrobial photodynamic inactivation: a bright new technique to kill resistant microbes. **Current Opinion in Microbiology**, v. 33, p. 67-73, 2016. doi: 10.1016/j.mib.2016.06.008.

IC59

Avaliação da influência dos parâmetros utilizados na Transformada de Laplace nas distribuições de T2 obtidas

SOLCIA, G.[1]; MONTRAZI, E. T.[1]; CARDOSO, C.[1]; PAIVA, F. F.[1]

gustavo.solcia@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Este projeto tem como objetivo geral estudar meios porosos através da complementariedade entre as técnicas de relaxometria e imagem por ressonância magnética (RM). Nessa primeira fase, examinou-se o processo de solução numérica da transformada inversa de Laplace através da variação de parâmetros de regularização em simulações, o que será importante para os estudos de relaxometria. O decaimento da magnetização é simulado através da soma de uma série de exponenciais e tratado pelo processamento numérico descrito em (1) utilizando MATLAB. Como este processo de inversão da transformada de Laplace é um problema mal posto, variações nos parâmetros de regularização implicam em mudanças na distribuição T2. Foram realizadas variações nesses valores para inspecionar seus efeitos na distribuição gerada de modo a orientar uma escolha de constantes que apresente relação com geometria do meio. Os parâmetros estudados foram a constante de regularização alfa e o número de pontos da transformada. Variando o alfa foi possível perceber que quanto maior for seu valor, mais largo é o pico de distribuição (independente da largura da distribuição de origem). Adicionando mais pontos na transformada, a curva tende a estreitar. O problema nesse caso passa a ser o tempo de processamento que cresce com o número de pontos. Além disso, os efeitos de variação da largura da curva são diferentes para tempos de relaxação com ordens de grandeza distintas. Devido a variações na largura, a sobreposição de picos se torna um problema que é sensível tanto ao número de pontos quanto ao alfa escolhido. Portanto, sem um estudo apropriado não é possível determinar se a distribuição é admissível. Assim sendo, o processamento de imagens de ressonância magnética é uma maneira de obter dados geométricos dos poros que indicam quantos picos devem ser observados na distribuição. As perspectivas futuras do presente trabalho incluem a utilização complementar de imagens e relaxometria por RM para estudos de meios porosos.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Transformada de Laplace. Distribuição T2. Relaxometria

Referências:

1 BORGIA, G.C.; BROWN, R.J.S.; FANTANAZZINI, P. Uniform-penalty inversion of multiexponential decay data: II. data spacing, T2 data, systematic data erros, and diagnostics. **Journal of Magnetic Ressonance**, v.147, n.2, p.273-285,2000.

IC60

Modelo "Bang-Bang"para a dinâmica dissipativa de sistemas quânticos simples

SOUSA, G. de[1]; BRITO, F. B. de[1]

guilherme2.sousa@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de sistemas quânticos abertos teve na década de 1980 o desenvolvimento de técnicas que permitiram a sua descrição de maneira consistente e quantitativa. Um dos primeiros trabalhos (1) sobre o assunto tratou o acoplamento de um sistema de dois níveis com um ambiente; o objetivo inicial consistia em entender o processo de termalização de um sistema simples acoplado com outro com diversos graus de liberdade, aqui referido como ambiente ou banho. Nosso objetivo é estudar a dinâmica desses sistemas abertos com a perspectiva de entender a relaxação térmica à partir de primeiros princípios. Inicialmente revisitamos a literatura de sistemas abertos em duas vertentes: dinâmica (1) e teoremas de flutuação. (2) Na primeira propomos um modelo de interação aos moldes do movimento browniano: em intervalos específicos o sistema sofre um quench em seu hamiltoniano que depende do ambiente, aqui tratado como um ruído gaussiano. Após algumas simplificações no sistema encontramos as taxas de relaxação das populações e da coerência de um sistema de dois níveis; a relação entre ambos segue como esperado que o sistema perde a coerência mais rapidamente do que relaxa termicamente. Paralelamente à essa abordagem estudamos meios de utilizar os teoremas de flutuação para inferir propriedades e informações sobre o sistema. Através de métodos de interferometria propostos no contexto de teoremas de flutuação (3), procuramos determinar informações sobre propriedades do banho. Em ambos os casos, o estudo dos sistemas abertos se mostra incrivelmente abrangente e geral. Até onde se sabe, não existem sistemas perfeitamente isolados na natureza, criando um grande potencial de desenvolvimento das técnicas para extração de informações de subsistemas de um todo. Em relação às abordagens estudadas no trabalho: a primeira pode nos auxiliar a entender o processo de termalização no caso mais geral; enquanto que o estudo dos teoremas de flutuação pode nos ajudar no estudo de propriedades de sistemas abertos.

Palavras-chave: Sistemas abertos. Dinâmica dissipativa. Teoremas de flutuação.

Referências:

1 CALDEIRA, A.; LEGGETT, A. Quantum tunnelling in a dissipative system. **Annals of Physics**, v. 149, n. 2, p. 374-456, 1983.

2 JARZYNSKI, C. Nonequilibrium equality for free energy differences. **Physical Review Letters**, v. 78, n. 14, p. 2690-2693, 1997.

3 MAZZOLA, L.; DE CHIARA, G.; PATERNOSTRO, M. Detecting the work Statistics through Ramsey-like interferometry. **International Journal of Quantum Information**, v. 12, n. 2, p.1461007-1-1461007-12, 2014.

IC61

Desenvolvimento de padrões de referência para sistemas ópticos em biofotônica

SOUZA, G. de[1]; ROMANO, R. A.[1]; MORIYAMA, L. T.[1]; KURACHI, C.[1]

giian.souza@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A desregulação de equipamentos ópticos prejudica a realização de medidas. Visando a maximização de precisão em experimentos, nosso projeto determinará um método de padronização e verificação da estabilidade de equipamentos de espectroscopia através da construção de phantoms referência para medidas de fluorescência, tempo de vida de fluorescência (1) e refletância. Serão utilizados materiais comuns (como borracha e PVC) a fim de comparação com phantoms produzidos em laboratório compostos de silicone bi-componente e resina epóxi bi-componente, ambos com espalhadores e/ou absorvedores. As medidas de fluorescência, tempo de vida de florescência e refletância serão realizadas utilizando um sistema de espectroscopia composto de lasers de excitação contínuos de comprimento de onda de 408 nm e 532 nm e lasers pulsados em 378 nm e 445 nm. Ao fim do período de dose meses, ainda será possível determinar a estabilidade dos equipamentos em função do tempo. Ao realizarmos a medida de tempo de vida de fluorescência, por exemplo, com um dos phantoms produzidos (silicone com base para maquiagem, alumina ou misto), obtivemos padrões de decaimento específicos para cada amostra e, através do fiting de cada uma dessas curvas de decaimento como um decaimento duplo-exponencial da forma: $F(t) = A_1 e^{-\frac{\tau_1}{t}} + A_2 e^{-\frac{\tau_2}{t}}$. Podemos comparar os valores dos taus e A entre as amostras e diferenciar os padrões e compará-los ao decaimento do tempo de vida de fluorescência da pele da mão dos integrantes do grupo. Obtivemos, por fim, os valores: Pele ($A_1 = 0,297 \pm 0,003; A_2 = 0,690 \pm 0,03$; $\tau_1 = 3,73 \pm 0,03$; $\tau_2 = 0,646 \pm 0,004$, Misto ($A_1 = 0,800 \pm 0,005$; $A_2 = 0,222 \pm 0,005$; $\tau_1 = 0,830 \pm 0,009$; $\tau 2 = 4,23 \pm 0,09$), Alumina ($A_1 = 0,862 \pm 0,005$; $A_2 = 0,153 \pm 0,006$; $\tau_1 = 0,629 \pm 0,005$; $\tau_2 = 2,86 \pm 0,07$) e Base para maquiagem ($A_1 = 0,176 \pm 0,004$; $A_2 = 0,830 \pm 0,004$; $\tau_1 = 3,20 \pm 0,06$; $\tau_2 = 0,689 \pm 0,005$). Demonstrando que o phantom pode ser utilizado como uma padronização dos parâmetros de medidas do equipamento, a fim de que toda medida realizada seja realizada a partir das mesmas configurações. Conclui-se, então, que através da construção de phantoms pode-se construir uma padronização para os equipamentos espectroscópicos. Gerando assim um padrão para que todas as medidas experimentais sejam equivalentes.

Palavras-chave: Tempo de vida de fluorescência. Padronização de equipamentos ópticos.

Referências:

1 EREZIN, M. Y.; ACHILEFU, S. Fluorescence lifetime measurements and biologicalilmaging. **Chemical Reviews**, v. 110, n. 5, p.2641-2684, 2009.

IC62

Descoberta de derivados 4-quinolinonas como candidatos a composto líder para o desenvolvimento de novos antimaláricos

SOUZA, J. O. de[1]; AGUIAR, A. C. C. A.[1]; ALMEIDA, S. M.[2]; CORREA, A. G.[2]; GUIDO, R. V. C.[1]

juliana2.souza@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal de São Carlos - UFSCAR

A malária é causada por protozoários do gênero *Plasmodium spp.*, responsável por 212 milhões de casos novos e 429 mil mortes em 2015. (1) Sua forma mais grave é causada pelo *Plasmodium falciparum*. As terapias combinatórias com derivados de artemisininas (ACTs) são a forma de tratamento recomendada pela OMS contra casos de malária falciparum, para redução da chance de geração de resistência aos antimaláricos atuais. Apesar disso, casos de resistência foram relatados para todos os antimaláricos, bem como aos ACTs, enfatizando à necessidade de desenvolvimento de novos medicamentos. (2) Em vista disso, o objetivo desse estudo é a descoberta de derivados 4-quinolinonas como candidatos a antimaláricos, através de ensaios de inibição de crescimento in vitro contra cepas sensível (3D7) e resistente (K1) a cloroquina, pirimetamina e cicloguanil. Testes preliminares indicaram que derivados 4-quinolinonas sintetizados pelo grupo da Profª. Arlene Correa (UFSCar) são inibidores do *P.falciparum in vitro*. O *P.falciparum*, cepas 3D7 e K1, foi mantido em cultura contínua a 37°C com meio RPMI. Para triagem dos compostos, foi feita diluição seriada para avaliar as doses de 10-0,150 μM, seguida da incubação com parasito em forma de anel, a 0,5% de parasitemia e 2% de hematócrito. Após 72h, as hemácias foram ressuspendidas e lisadas, e foi adicionado SYBR Safe para quantificação do DNA. Após incubação por 30 minutos foi feita a leitura de fluorescência (excitação a 485 nm e emissão a 535 nm). Os valores de intensidade foram analisados na forma de curvas dose-resposta no software OriginPro 9.0, e as concentrações inibitórias médias (IC_{50}) dos compostos determinadas. Os compostos com IC50 abaixo de 10 μM tiveram sua citotoxicidade testada frente à linhagem celular HepG2, avaliando doses de 400-6,25 μM. Após incubação por 24h com os compostos, foi adicionado o sal brometo de 3-(4,5-dimetil-2-tiazolil)-2,5-difenil-2H-tetrazólio (MTT), cuja redução por células vivas forma cristais de formazan. A diluição dos cristais em DMSO e posterior leitura de absorbância a 570 nm resultou em valores de intensidade que foram analisados na forma de curvas dose-resposta, e o valor de MCL_{50} (concentração letal média) para cada composto foi determinado. O valor de índice de seletividade (IS) foi calculado a partir da razão de MCL_{50} sobre IC_{50}, e valores maiores que 10 indicam um composto não citotóxico. Uma cultura contínua de K1 foi estabelecida, e sua susceptibilidade a antimaláricos foi determinada para confirmar a identidade da cepa. O perfil de resistência a cloroquina, pirimetamina e cicloguanil foi confirmado, e os valores de IC50 para esses antimaláricos bem como mefloquina e artesunato foram condizentes com valores da literatura. Entre 16 compostos testados frente à cepa 3D7, 7 foram ativos, sendo que 3 tiveram $IC_{50} < 2$ μM e serão testados contra a cepa K1. Os compostos da série não demonstraram citotoxicidade. Esses resultados são promissores para uma triagem inicial, e confirmam a importância da série como candidatos a antimaláricos. Os dois compostos mais promissores

tiveram IC_{50} de 290 e 470 nM e IS > 212,7 e > 344,8, respectivamente. Os valores de IC_{50} determinados serão utilizados para desenvolvimento de estudo SAR.

Palavras-chave: Malária. Quinolinonas. Triagem.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World malaria report 2016**. Disponível em: <http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/252038/1/9789241511711-eng.pdf?ua=1>. Acesso em: 21 ago. 2017.

2 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Guidelines for the treatment of malaria**. Disponível em: <http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/162441/1/9789241549127_eng.pdf>. Acesso em: 21 ago. 2017.

IC63

Influência da radiação ultravioleta no envelhecimento do cristalino humano e na formação da catarata relacionada à idade

SOUZA, R. F. S. de[1]; CASTRO NETO, J. C. de[1]; MATOS, L. de[1]; NEVES, N. I. de S.[1]

rafaelsantiago9485@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A catarata é uma das principais causas de cegueira no mundo. A Organização Mundial da Saúde divulga que a catarata relacionada à idade é responsável por 48% de cegueira mundial, o que representa 18 milhões de pessoas. (1) Este número tende a crescer devido ao aumento da expectativa de vida. Diversos fatores de risco têm sido identificados além da idade, como composição genética, exposição à luz ultravioleta e diabetes (2), incluindo anormalidades de desenvolvimento, trauma, desordens metabólica e mudanças induzidas por medicamentos. A catarata é caracterizada pelo aumento da absorção e do espalhamento da luz no cristalino do olho, resultando em uma diminuição da transmissão da luz à retina. Ao longo dos anos, o cristalino desenvolve um filtro ultravioleta (UV), protegendo assim a retina de danos fotoquímicos que podem ser causados pela radiação UV. (3) Muitos estudos têm revelado que a radiação UV tem um papel importante na formação de catarata relacionada à idade, sendo o UV-B mais prejudicial, mas os mecanismos que ocorrem ainda não são claros. Portanto, melhorar o conhecimento sobre a formação da catarata pode fornecer um entendimento nos processos responsáveis pelo início da catarata, conduzindo a novos tratamentos não invasivos, possibilitando o desenvolvimento de biomateriais para a fabricação de lentes intraoculares, ou até mesmo o retardo da catarata. O projeto tem como objetivo geral entender como a radiação ultravioleta atua na questão do envelhecimento do cristalino e na formação da catarata por meio da utilização de cristalinos bovinos e suínos e com a utilização de três técnicas para a análise de qualquer mudança química e óptica que a indução de catarata por radiação UV tenha causado: Espectroscopia Raman, microscopia confocal de fluorescência e microscopia óptica.

Palavras-chave: Catarata. Espectroscopia. Raman.

Referências:

1 ARTAL, P. Optics of the eye and its impact in vision: a tutorial. **Advances in Optics and Photonics**, v. 6, n. 3, p. 340-367, 2014.

2 ASBELL, P. A. et al. Age-related cataract. **Lancet**, v. 365, n. 9459, p. 599-609, 2005.

3 TRUSCOTT, R. J. W. Human cataract: the mechanisms responsible; light and butterfly eyes. **International Journal of Biochemistry and Cell Biology**, v. 35, n. 11, p. 1500-1504, 2003.

IC64

Estudo de moléculas orgânicas (perilenos) para aplicações em meios ativos de lasers: aplicação em lasers aleatórios

SOUZA, W. F. de[1]; DE BONI, L.[1]

willian.falcao.souza@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: O presente projeto teve como objetivo o aprendizado sobre cavidades lasers tendo em vista a aplicação em lasers aleatórios. Assim foi realizado um estudo de emissão laser (aleatório) em meio espalhador contínuo através de moléculas orgânicas, tendo como finalidade analisar a efetividade e coerência da emissão de laser randômico utilizando uma solução da molécula perileno PTCD-Ph contendo nanopartículas de TiO2 (Dióxido de titânio).Métodos e Procedimentos: Foi utilizado um laser de Nd:YAG Q-Switched e mode-locked,em frequência dobrada no comprimento de onda de 532 nm a uma frequência de repetição de 20 Hz para excitar a amostra alocada em uma cubeta contendo Perileno PTDC-Ph a uma concentração de 10-3 Molar dissolvido em solução composta de 10% TFA e 90% DCM onde foram adicionados 0,6 mg de nanopartículas de TiO2. A realização experimental em si consistiu na obtenção do espectro de emissão do laser randômico em função da potencia do laser de excitação.Resultados: Analisando os dados é visto que conforme a potência do bombeio aumenta, a intensidade de emissão do laser randômico também aumenta, e essa começa a ser confinada em comprimentos de onda centrados nos máximos das bandas de emissão. A diminuição da largura da banda de emissão é um indicativo forte da presença de emissão estimulada (1), pois a coerência, ou a correlação entre os fótons emitidos aumenta consideravelmente para ambas as bandas de emissão.Conclusões: Foi notada uma eficiente de emissão expressiva para duas regiões bem distintas espectralmente. Sendo assim, foi comprovada a previsão a partir da observação dos picos de emissão da intensidade de fluorescência, sendo que as nanopartículas tiveram papel importante no ganho energético do laser no meio devido ao espalhamento facilitado, não havendo a necessidade da utilização de espelhos e uma cavidade como em um laser convencional.

Palavras-chave: Laser aleatório.

Referências:

1 SILVA, D. M. **Desenvolvimento de métodos para a geração e controle da emissão lasers aleatórios e speckle**. 2016. 96 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016.

IC65

Desenvolvimento e implementação de um método de processamento de imagens de Ressonância Magnética para avaliação de cirrose e função hepática

TONIN, Y. R.[1]; PAIVA, F. F.[1]

yuri@df.ufscar.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Em RM, a magnetização observada surge quando núcleos de Hidrogênio, por exemplo, são colocados na presença de um campo magnético externo. Essa magnetização pode ser alterada utilizando um pulso de radiofrequência. Uma vez alterada, essa magnetização retorna ao eixo longitudinal com um tempo característico T1. (1) Utilizando o agente de contraste "ácido gadoxético", demonstrou-se que tecidos cirróticos e saudáveis apresentam diferentes variações ΔT1 no valor do tempo de relaxação antes e depois da aplicação do ácido. (2) Neste trabalho estamos desenvolvendo e implementando uma plataforma para gerar mapas paramétricos de T1 a partir de imagens de RM do fígado para viabilizar a avaliação não-invasiva do tecido e da função hepática. A ferramenta de processamento está sendo implementada em Python. Dadas imagens de um mesmo paciente obtidas utilizando diferentes ângulos de flip, o programa analisará a variação média do sinal de cada região para gerar os mapas de T1 a partir do modelo de variação do sinal de RM. Parte da interface gráfica já está implementada e funcional, onde usuário pode importar as imagens que serão usadas para o processamento e visualizá-las, explorando todos os cortes e todos os ecos, por exemplo. O mesmo pode ser feito para uma aquisição com múltiplos ângulos de flip. Além disso, já é possível selecionar uma região de interesse na imagem para que o processamento seja feito. Mapas paramétricos de tempos de relaxação constituem uma abordagem promissora para avaliar de maneira não-invasiva o tecido e a função hepática. Entretanto, para que isso possa ser feito de maneira simples pelo usuário, é importante que se disponibilizem ferramentas que gerem esse tipo de informação.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Imagem.Processamento.

Referências:

1 BROWN, R.W. ey al. **Magnetic resonance imaging:** physical principles and sequence design. New York: Wiley-Blackwell, 2014.

2 BESS, C. et al. 3D T1 relaxometry pre and post gadoxetic acid injection for the assessment of liver cirrhosis and liver function. **Magnetic Resonance Imaging**, v 33,n.9,p.1075 – 1082,2015.

IC66

Diálogos em um espaço de educação não formal

VIZOTTO, M. E.[1]; CAMARGO, I. L. B. da C.[1]; SANTOS, G. C.[1]

maria.vizotto@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A visita a um espaço de educação não-formal pode ser realizada de forma autônoma ou através da mediação entre os elementos expositivos e o visitante. O objetivo deste trabalho é identificar se nas intervenções realizadas no EIC os saberes de mediação, evidenciados nos estudos de Queiróz et al. (1), são manifestos e se há algum padrão entre sua ocorrência e um tipo específico de público. (1) Há vários tipos de abordagem durante a intervenção, ou também chamada de "mediação museal". Para que ela seja feita de maneira concreta os mediadores têm de estar bem preparados. Assim, as recomendações da literatura relativa à mediação e à aprendizagem por livre escolha, ou seja, aquela realizada em espaços não formais, direcionam a formação dos mesmos. A partir das recordações de como os diferentes públicos se comportam durante as visitas ao EIC serão identificados os saberes de mediação, de acordo com os estudos de Queiróz et al. (1) Embora a exposição seja a mesma para todos, as experiências de visitação apresentam particularidades segundo idade, bem como também interesse do próprio visitante. A dialogicidade norteia a mediação tutor-visitante no museu do EIC em visitas espontâneas ou agendadas. Os estudos de Queiróz et al. apresentam diferentes saberes necessários de serem desenvolvidos no processo de formação dos mediadores. (1) Para o público de visita agendada, composto em grande parte de turmas de escolas da região, busca-se abarcar todos os saberes dado tempo maior de mediação e o fato de professores da estarem presentes e demandarem informações as quais geralmente não ocorrem no espontâneo. Percebe-se que na mediação do público espontâneo alguns saberes são mais predominantes em diferentes faixas etárias. Reconhecendo que a educação pode ser desenvolvida em espaços outros que não o escolar, é legítimo destacar a necessidade de espaços educativos, como os de Educação Não Formal, para auxiliar na alfabetização científica dos indivíduos. O mediador uma vez constatando peculiaridades segundo perfil de público, consegue melhor atender suas expectativas e necessidades, garantindo um momento de real engajamento e reflexão.

Palavras-chave: Mediação. Museus de ciências. EIC.

Referências:

1 QUEIRÓZ, G. et al. Construindo saberes da mediação na educação em museus de ciências: o caso dos mediadores do Museu de Astronomia e Ciências Afins/ Brasil. **Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 2, n. 2, p. 77-88, 2002.

IC67

Análise em campo do espectro infravermelho da clorofila em um ambiente de diversidade de espécies e clima

VIZIOLI, H. T.[1]; CASTRO NETO, J. C. de[1]

helena.vizioli@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Esta pesquisa tem como objetivo principal contribuir para a preservação do meio ambiente a partir do estudo da agricultura, por meio da análise da taxa de oxigênio dissolvido na água de irrigação. Esse estudo é realizado utilizando um oxímetro ótico que permite relacionar essa taxa com a intensidade de onda fotoluminescente emitida. Para o alcance dos objetivos, a presente pesquisa foi estruturada em duas etapas: a) condensação de repertório, na qual foram abordados temas, tais como: sustentabilidade, meio ambiente, estudo da água, agricultura (1-2), datalogger, estudo do uso de oxímetros existentes no Brasil e no exterior. b) investigações experimentais, nas quais foram estudados e analisados os componentes de um oxímetro ótico digital de modo a compreender e propor inovações para essa tecnologia. Nessa etapa foi realizada a montagem de um sistema de medição de oxigênio dissolvido em água com componentes disponíveis no mercado. Por fim, foi executado um estudo comparativo entre diversas amostras de água com diferentes taxas de oxigênio dissolvido, relacionando essa taxa com a intensidade de onda fotoluminescente. Realizando a análise de amostras de água com diferentes taxas de oxigênio dissolvido, foram obtidas imagens do espectro de excitação e de emissão do complexo de rutênio - sensível ao oxigênio - presente no oxímetro. Segundo a literatura (3), esse complexo absorve comprimentos de onda próximos a 450 nm, sendo utilizado, dessa forma, um LED de excitação de 470nm. Através das imagens obtidas, tem-se que o comprimento de emissão desse complexo é na faixa de 620 nm, como é, de fato, apontado na literatura e, ao fazer a montagem experimental, notou-se que o espectro de excitação apresenta intensidade consideravelmente mais elevada do que o de emissão. Por fim, observou-se que quanto maior for a concentração de oxigênio, a intensidade do espectro de emissão do rutênio é menor. Esse comportamento é matematicamente explicado com a linearização de Stern-Volmer, que relaciona a intensidade da fluorescência na ausência (Io) e na presença (I) de oxigênio segundo a equação Io/I = 1+KSV[O2]. Com o estudo fica demonstrada a possibilidade e eficácia de controlar a taxa de oxigênio dissolvido na água de irrigação a partir do uso de um oxímetro ótico. Existem, contudo, meios de aprimorar esse controle para que haja menor interferência da temperatura, salinidade e umidade no espectro de emissão do rutênio. Propõe-se, dessa forma, o desenvolvimento de um oxímetro ótico que minimize esses efeitos e que tenha a característica digital para facilitar o controle contínuo da taxa de oxigênio dissolvido na água de irrigação.

Palavras-chave: Oxímetro. Ótica. Água.

Referências:

1 BRITO, R. A. L.; ANDRADE, C. L. T. Qualidade da água na agricultura e no ambiente. **Informe Agropecuário**, v. 31, n. 259, p. 50-57, 2010.

2 VIEIRA FILHO, J. E. R.; FISHLOW, A. (Ed.). **Agricultura e indústria no Brasil**: inovação e competitividade. Brasília: Instituto de Pesquisa Econômica Aplicada, 2007.

3 FERREIRA, M. A. C. **Desenvolvimento de sensores de oxigênio dissolvido utilizando métodos eletroquímicos e óticos para monitoramento em tempo real da qualidade da água**. 2007. 154 f. Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007.

IC68

Espalhamento de primeira hiperpolarizabilidade em polímeros orgânicos quirais

WESTIN, R. G.[1]; DE BONI, L.[1]

raian.westin@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Estudar o espalhamento não linear de primeira ordem de polímeros orgânicos quirais através da alteração das polarizações do campo eletromagnético do laser (linear para circular a esquerda ou direita). Esse efeito é observado quando luz laser de alta intensidade induz uma mudança na polarizabilidade do material. Métodos e Procedimentos: Esse estudo foi feito usando uma aparato experimental de hyper-Rayleigh (1) que continha um LASER de Nd:YAG Q-switched e mode-locked. As medidas foram feitas em diferentes concentrações molares do polímero quiral de forma a obter uma dependência linear do sinal de espalhamento não linear de primeira ordem. Dessa dependência, o coeficiente angular revela a magnitude o efeito óptico não linear de geração de segundo harmônico molecular quando esse é comparado com o de um material já bem conhecido (Para-Nitroanilina (PNA)). Resultados: Com a calibração da técnica experimental com a molécula de PNA, foi possível obter a relação entre a intensidade espalhada do sinal não linear (gerada) com a intensidade incidente do LASER. Essa relacão foi usada para se determinar o valor referente ao polímero quiral, o qual apresentou um sinal não linear de segundo harmônido ordens de grandeza superior ao do PNA. Um valor de aproximadamente $3400 \times 10^{-}30cm^5/esu$ foi obtido para o polímero quando luz linearmente polarizada foi usada. Para o PNA, esse resultado é de apenas $26 \times 10^{-}30cm^5/esu$. Quando luz circularmente polarizada a direita e a esquerda foram usadas para excitar o polímeros, foi observado uma diminuição em torno de 18%. Sendo essa diminuição um pouco mais significativa para a polarização circular a esquerda do LASER. Os valores obtidos para as polarizações circulares a direita e esquerda foram, respectivamente, $2900 \times 10^{-}30cm^5/esu$ e $2200 \times 10^{-}30cm^5/esu$. Conclusões: Os resultados de espalhamento não lineares de primeira ordem observados no polímeros foram significantemente superiores a moléculas orgânicos pequenas como o PNA. Um explicação para esse aumento significativo quando comparado a molécula do PNA pode ser descrita pelo aumento da desordem estrutural. O sinal de espalhamento de segundo harmônico cresce com a diminuição da simetria do material. Outro fato importante é que o espalhamento induzido por luz linearmente polarizada mostrou-se superior aos gerados com luz circularmente polarizada em 25%. No caso das polarizações circular, a circularmente polarizada à direita apresentou um sinal consideravelmente superior à esquerda. Umas explicação para isso advém do fato do polímero ser quiral, e possivelmente uma das polarizações interage mais do que a outra.

Palavras-chave: Hyper-Rayleigh. Quiral. Hiperpolarizabilidade.

Referências:

1 FRAZEN, P. L; MISOGUTTI, L. ;ZILIO, S. C. Hyper-Rayleigh scattering with picosecond pulse trains. **Applied Optics**, v. 47,n.10, p.1443-1446,2008.

IC69

Descoberta de novos compostos híbridos de Artesunato e Artemisinina como novos candidatos para o desenvolvimento de antimaláricos

ZANINI, C. L.[1]; PANCIERA, M.[2]; SANTOS, E. F. S.[2]; OLIVA, G.[1]; CORREIA, C. R. D.[2]; GUIDO, R. V. C.[1]; AGUIAR, A. C. C. A.[1]

camila.zanini@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química - UNICAMP

A malária, doença infecciosa causada por protozoários do gênero *Plasmodium* spp., representa um grave problema de saúde pública para o mundo. A Organização Mundial da Saúde (OMS) estima que por ano ocorram 219 milhões de novos casos e cerca de 660 mil mortes, principalmente em crianças menores de 5 anos e mulheres grávidas. (1) No Brasil foram registrados 143 mil casos de malária em 2015, sendo 99% casos autóctones na região endêmica da amazônia brasileira. (2) O surgimento e a disseminação de parasitos resistentes à maior parte dos antimaláricos disponíveis, inclusive aos derivados da artemisinina, associados à dificuldade de controle do vetor, tornam o controle da doença complexo e dependente da quimioterapia medicamentosa específica. (3) Nesse cenário, torna-se de extrema importância a descoberta de agentes quimioterápicos inovadores contra a malária. Atualmente, a estratégia empregada para o tratamento da malária causada pelo *P. falciparum* é a associação de fármacos, que agem por diferentes mecanismos de ação, com os derivados da artemisinina (ACT). Sendo assim, o desenvolvimento de compostos híbridos para o tratamento da malária humana apresenta uma grande vantagem, que poderá reduzir os custos do tratamento desta doença negligenciada, bem como facilitar a administração a partir da utilização de monoterapia. Além disso, o conceito de hibridização de dois ou mais farmacóforos ativos em uma única entidade química tem sido amplamente aplicada para a geração de compostos *Leads* contra diversas doenças, incluindo malária. Recentemente, uma série diversa de marinoquinolinas sintetizados pelo Prof. Carlos Roque Duarte Correia do Departamento de Química da Universidade Estadual de Campinas foi avaliada em nosso laboratório, e compostos promissores com atividade antiplasmodial foram identificados. Sendo assim, duas marinoquinolinas desta série (MQ10 e MQ12) foram hibridizadas com os antimaláricos artesunato e artemisinina para a investigação da atividade frente culturas de *P. falciparum.* O valor de IC_{50} dos compostos híbridos foi obtido e comparado com os antimaláricos isolados (artesunato IC_{50}= 9 nM e artemisinina IC_{50}= 16 nM). Foi possível observar uma potencialização de 5 vezes no valor de IC_{50} dos antimaláricos quando hibridizados com as MQ10 e MQ12. Sendo assim, 5 novas Marinoquinolinas foram sintetizadas e avaliadas in vitro para posterior hibridização das mais ativas com os antimaláricos. Os valores de IC_{50} variaram de 6 $\pm$ 0,1 à 0,280 $\pm$0,06 μM. A maquinoquinolina mais potente, MQ047, será hibridizada com os antimaláricos para a realização de ensaios de atividade.

Palavras-chave: Malária. Marinoquinolinas. Híbridos.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World Malaria Report 2016.** Disponivel em: <http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/252038/1/9789241511711-eng.pdf?ua=1>. Acesso em: 23 ago. 2017.

2 FERREIRA, M.; CASTRO, M. Challenges for malaria elimination in Brazil. **Malaria Journal, v.** 15, n.1, p.284,2016.

3 ENSERINK, M. If artemisinin drugs fail, whats plan B? **Science**, v.328, n.5980, p.846, 2010.

IC70

Nanopartículas luminescentes de SiO2 dopadas com terras raras

ZAVAN, R. A.[1]; CAMARGO, A. S. S. de[1]

rodolfo.zavan@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O dióxido de silício (SiO_2) é um óxido amplamente utilizado como matriz precursora em várias aplicações tecnológicas, entre elas telecomunicações. Nanopartículas (NPs) de SiO_2 tem sido estudadas por sua estabilidade térmica, mecânica e biocompatibilidade (1), viabilizando aplicações em biofotônica e imageamento. O presente estudo tem o objetivo de otimizar os processos de obtenção de NPs de SiO_2 dopadas com íons terras raras trivalentes, Európio, Térbio, e Túlio (Eu^{3+}, Tb^{3+} e Tm^{3+}, respectivamente), e caracterizar estes materiais do ponto de vista estrutural, óptico e espectroscópico, como potenciais emissores manométricos no visível e infravermelho próximo. O métodos sol-gel foi empregado na síntese das NPs seguindo a proposta de Stöber. (2) A caracterização estrutural e morfológica das mesmas foi feita por difração de raios-X (DRX) e microscopia eletrônica de transmissão (MET). As NPs de sílica são esféricas com tamanho médio de 153 +/- 29 nm. As difrações de raios-X mostraram que as NPs de SiO_2 são amorfas, que era esperado devido ao método de obtenção escolhido. O íon Eu^{3+} apresentou emissão mais intensa está em torno de 614 nm que é correspondente a transição eletrônica$^5D_0 \rightarrow ^7F_{2.}$. O íon Tb^{3+} apresentou maior emissão por volta do 544 nm, correspondente a transição eletrônica$^5D_4 \rightarrow ^7F_{5.}$. Por fim, o íon Tm^{3+} apresentou maior emissão em 459 nm, correspondente a transição eletrônica$^1D_2 \rightarrow ^3F_4$. Foram realizadas também medidas de tempo de vida dos íons, que apresentaram valores similares com os quais encontrados na literatura.

Palavras-chave: Nanopartículas. SiO2. Terras raras.

Referências:

1 ILER, R. K. **The chemistry of silica**: solubility, polymerization, colloid and surface properties and biochemistry of silica. New York: John Wiley and Sons, 1979. 866 p.

2 STÖBER, W.; FINK, A.; BOHN, E. Controlled growth of monodisperse silica spheres in the micron size range. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 26, n. 1, p. 62-69, 1968.

PG1

Cladding waveguide in L-threonine crystals inscribed by femtosecond laser

ALMEIDA, G. F. B.[1]; MARTINS, R. J.[1]; SIQUEIRA, J. P.[1]; ALMEIDA, J. M. P. de[1]; RODRIGUES JUNIOR, J. J.[2]; MEDONCA, C. R.[1]

gustavo.foresto.almeida@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Departamento de Física - UFSCar

The use of femtosecond laser pulse as tool to produce waveguides is a consensus among the optics and photonics community. Its ability to modify optical properties of a wide range of materials and three-dimension writing flexibility allows the fabrication of several waveguide based photonic devices, such as couplers (1), splitters, waveplates and interferometers. Glasses of various compositions have been used to host femtosecond laser waveguides. In the majority of cases, the ultrashort pulse induces a positive change in the refractive index and the waveguide is produced along the laser path. Although the refractive index change is small, usually on the order of 10^{-3}, structural modification can harm material properties; for example in the case of crystals that their main properties are related to the organized structure. Therefore, cladding waveguides came as a solution for fabricating waveguides in crystalline materials while keeping their properties. Since pulse energies higher than the threshold are employed, a less dense region with lower refractive index is produced and light is guided within the unmodified region. Such cladding waveguides have been produced in KDP, KTP and other crystals that exhibit laser action (e. g. Nd:YAG). (2) Organic materials have gain attention for their interesting linear and nonlinear optical properties and by their low pulse energy threshold that does not require the use of amplified laser, characteristics appealing for the soft photonics applications. In this context, L-threonine organic crystals present low index of refraction, wide transparency window (from 250 nm up to 1500 nm), second harmonic generation (SHG) similar to KDP and low third order susceptibility. (3) In this work, we fabricated cladding waveguides with circular cross-section in L-threonine crystals by using a Ti:sapphire laser oscillator (50-fs, t 800 nm and 5 MHz) and a computer controlled three-dimensional translation stage. The 5.45 mm long waveguides with 55 μm of diameter were characterized via optical microscopy and their guiding properties were analyzed in a microscope objective based coupling system. Continuous wave light at 800 nm was coupled into the waveguides with different numerical apertures (NA) and measurements reveal that higher total transmission were achieved with lower input NA lens. Significant variation in the amount of transmitted light was observe, $\sim$1% for NA = 0.65 and $\sim$25% for NA = 0.1. The same behavior was observed when coupling was performed at 632.8 nm. 50-fs laser pulses centered at 800 nm were coupled into the cladding waveguides and guided second harmonic generation was observed. In conclusion, we were able to fabricate and characterize cladding waveguides in L-threonine, as well as explore its second-harmonic generation properties. We believe that L-threonine crystals are good candidates for nonlinear waveguide photonic devices.

Palavras-chave: Ultrafast laser processing. Waveguide. Organic crystals.

Referências:

1 NOLTE, S. et al. Femtosecond waveguide writing: a new avenue to three-dimensional integrated optics. **Applied Physics A** materials science & processing v.77, n.1, p.109-111,2003.

2 RODRIGUES JUNIOR, J.J. et al. Optical properties of L-threonine crystals. **Optical Materials**, v.22, n.3, p.235-240,2003.

3 JIA, Y. et al.Femtosecond laser micromachined ridge waveguide lasers in Nd:YAG ceramics. **Optical Materials**, v. 36, n.2, p.228-231,2013.

PG2

Porque os estômatos de folhas de plantas com superfície abaxial roxa são verdes? Uma pergunta baseada em evidências experimentais específicas.

ALMEIDA FILHO, H. A. de.[1]; BRUNO, O. M.[2]

beto@ursa.ifsc.usp.br

[1] Instituto de Quimica de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Evoluiu na superfície da terra a 400 milhões de anos uma célula especializada de plantas denominada estômato. Esta célula surgiu ao mesmo tempo em que as plantas emergiram para o ambiente terrestre, com função de válvula para troca de gases. (1) É uma questão bem estabelecida na literatura a observação de cloroplastos e por conseguinte de clorofila no interior dos estômatos (2), por isso a sua cor verde. Entretanto uma intrigante questão surgiu neste trabalho a partir da observação microscópica de estômatos verdes na superfície abaxial roxa de 6 espécies de plantas: *Oxalis atropurpurea*, *Ctenante openheimmiana*, *Tradescantia pallida*, *Tradescantia zebrina*, *Tradescantia minima* e *Callisia repens*. Todas estas espécies apresentam estômatos verdes com cloroplastos no seu interior e estão sobre uma superfície abaxial roxa , embora a espécie *Oxalis atropurpurea* apresente variação de cor na epiderme abaxial (cor variando entre púrpura e verde). Observou-se sobretudo nesta ultima espécie que plantas crescidas em condições de sombra (baixo fluxo de fótons) apresentam os mesmos estômatos verdes sob a epiderme abaxial purpura. Os espectros de absorção de luz UV/VIS entre 200-1000 nm para pigmentos extraídos de folhas de mesma massa da planta *Oxalis atropurpurea* com epiderme abaxial visivelmente purpura , mostram que há absorção de luz verde nos comprimentos de onda entre 500 e 550 nm nas plantas que apresentam pigmento visível roxo, o que é característico da presença de antocianinas. Ambas as plantas (verdes e roxas) apresentam grande conteúdo de clorofila A, que é evidenciado pela absorção de luz azul ente 380 e 450 nm e vermelha entre 650 e 700nm. Um numero maior de plantas com epiderme abaxial roxa crescidas sob baixo fluxo de fótons (PPFD) (80- 300 e μmol m-2*s-1) (80% , N= 200) foi encontrado em relação as plantas que apresentavam epiderme abaxial verde. Baseado nestas evidências surgem as seguintes questões: Porque mesmo sob condições de crescimento sob fluxo de fótons muito baixo os estômatos de certas plantas permanecem verdes em uma epiderme abaxial roxa? Porque um pigmento roxo com absorção de luz verde está presente na epiderme abaxial já que esta esta voltada contra o sol ?

Palavras-chave: Estômatos. Plantas.

Referências:

1 RAVEN, J. A. Selection pressures on stomatal evolution. **New Phytologist**, v. 153, n. 3, p. 371-386, 2002.

2 ZEIGER, E. et al. The guard cell chloroplast: a perspective for the twenty first century. **New Phytologist**, v. 153, n. 3, p. 415-424, 2002.

PG3

Estudo do recobrimento biológico de nanossuperfícies por modelagem computacional: aplicação no desenvolvimento de imunonanossensores

AMARANTE, A. M.[1]; IERICH, J. C. M.[2]; MORAES, A. de S.[2]; SOUZA, D. G. B.[3]; FRANCA, E. de F.[4]; FREITAS, L. C. G.[2]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de[1]; LEITE, F. de L.[2]

amarante_adriano2@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos – USP

[2] Universidade Federal de São Carlos – UFSCAR

[3] Universidade Estadual Paulista – UNESP

[4] Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Nesta etapa do trabalho as técnicas de modelagem molecular computacional (MMC) descreveram as nanossuperfícies funcionalizadas (recobertas) com biomoléculas do sistema imunológico de forma orientada. (1) O objetivo principal proposto do projeto é avaliar as forças intermoleculares provenientes das interações antígeno-anticorpo (funcionalizados em nanossuperfícies) relacionadas à Neuromielite Óptica (NMO). Para isso foi necessário o desenvolvimento de uma inovadora metodologia que engloba técnicas de mutagênese computacional para a geração de modelos de anticorpos, partindo apenas da estrutura do antígeno. Sendo a NMO uma doença inflamatória autoimune na qual o próprio sistema imunológico reage contra os nervos ópticos e a medula espinhal, causando lesão desmielinizante (2), a pesquisa desenvolvida visa direcionar e corroborar experimentos envolvendo imunonanossensores de microscópio de força atômica (*AFM*, do inglês *atomic force microscope*), simulações de dinâmica molecular (DM) e dinâmica molecular direcionada (SMD, do inglês, *Steered Molecular Dynamics*). (3) Os novos modelos e protocolos propostos já estão sendo correlacionados com resultados experimentais de AFM, como as medidas de curvas de força, com funcionalização não orientada, apresentadas neste trabalho.

Palavras-chave: Modelagem molecular computacional. Atomic force microscope. Dinâmica molecular.

Referências:

1 AMARANTE, A. M. et al. Modeling the coverage of an AFM tip by enzymes and its application in nanobiosensors. **Journal of Molecular Graphics & Modelling**, v. **53,** p. 100–104, 2014. doi: 10.1016/j.jmgm.2014.07.009.

2 WATERS, P. J. et al. Serologic diagnosis of NMO: a multicenter comparison of aquaporin-4-IgG assays. **Neurology**, v. **78,** n. 9, p. 665–671, discussion 669 ,2012.

3 ISRALEWITZ, B. et al. Steered molecular dynamics investigations of protein function. **Journal of Molecular Graphics & Modelling**, v. **19,** n. 1, p. 13–25, 2001.

PG4

Estudo de propriedades elétricas das estruturas de células solares

AMORIM, D. R. B.[1]; FARIA, R. M.[1]

danirba@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Dispositivos fotovoltaicos, também conhecidos por células solares, são aqueles que produzem de energia elétrica a partir da energia da luz do Sol. A camada ativa de um dispositivo fotovoltaico é um semicondutor, e com o advento da orgânica eletrônica surgiram as células fotovoltaicas orgânicas (*Organic Photovoltaics – OPVs*). Os OPVS encontram-se ainda em fase de pesquisa, e há ainda muitas dificuldades a serem vencidas até que cheguem ao mercado. A melhora de sua eficiência de conversão e o aumento do seu tempo de vida de operação estão entre os maiores desafios a serem superados. (1) Este último se deve principalmente à degradação causada pela ação do ar, em particular do oxigênio. Do lado da eficiência, a dificuldade está em eliminar as perdas relativas á recombinação entre os portadores de cargas que são gerados pela absorção de luz. Este trabalho se propõe a estudar os efeitos causados pela atmosfera ambiente no desempenho de OPVs fabricados em nosso laboratório. Para isto, foram feitas medidas de corrente *versus* tensão (medidas IV) para caracterizar os dispositivos sob iluminação, tanto naqueles que foram protegidos em atmosfera de N_2 (nitrogênio), quanto nos que foram expostos à atmosfera ambiente. (2) Também foram feitas medidas de transiente de fotovoltagem (TPV), de onde obteve-se o tempo de vida (τ) dos portadores fotogerados. Observamos que τ aumenta devido à exposição principalmente em baixas temperaturas. Além destas medidas, foram iniciados estudos usando soluções numéricas das equações de transporte, em considerando-se a igualdade para as mobilidades dos portadores negativo e positivo, Esses estudos quantitativos foram úteis para verificar do desempenho dos dispositivos sobre essas condições a ao mesmo tempo para propor um modelo analítico de fotocorrente.

Palavras-chave: Fotovoltaico: Fotocorrente; Caracterização.

Referências:

1 GREEN, M. A. et al. Solar cell efficiency tables (Version 46). **Progress in Photovoltaics:** research and applications. v. 23, n.7, p. 1–9, 2015.

2 NORMAN., K.; KREBS, F. C. Stability / degradation of polymer solar cells. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, v. 92, n.7 p. 686–714, 2008.

PG5

Supercondutores holográficos multi-componentes

APRILE, N. P.[1]; HARTMANN, B.[1]

nathaprile@yahoo.com.br

[1] Instituto de Física São Carlos - USP

Desde o advento da dualidade "*gauge-gravity*", soluções do tipo buraco negro no espaço-tempo Anti-de Sitter (AdS) foram usadas para descrever fenômenos de acoplamento forte na física da matéria condensada. Um exemplo é a descrição holográfica da supercondutividade de alta temperatura, para o qual - até agora - nenhuma descrição microscópica existe no padrão da teoria da matéria condensada. (1) No meu trabalho estou estudando supercondutores holográficos multi-componentes, que - no lado da gravidade - são descritos por buracos negros no AdS com uma variedade de campos em seu horizonte que são não triviais e que interagem.

Palavras-chave: Supercondutores holográficos. Dualidade "gauge-gravity". "AdS/CFT correspondence".

Referências:

1 CAI, R. Introduction to holographic superconductors models. **Science China Physics, Mechanics and Astronomy**, v. 58, n. 6, p. 1-46, June 2015.

PG6

Análises dinâmicas e modelagem de osciladores biológicos

ARAUJO, G. D.[1]; MAIA, L. P.[1]

guilherme.david.araujo@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O campo de pesquisas em biologia sistêmica é resultado de uma abordagem interdisciplinar de modelagem matemática e análise computacional em sistemas biológicos. Os modelos em biologia sistêmica, em geral, têm como objetivo investigar a emergência de propriedades, funções e novas redes de interação em sistemas caracterizados pela integração de diversos componentes. A ideia é buscar maior entendimento do processo de múltiplas camadas que promove a criação de órgãos e indivíduos, sistemas integrados e especializados, através de redes de interações que começam no nível molecular. Podemos entender os sistemas em biologia como componentes biológicos e suas funções se relacionando para formar componentes integrados e novas funções.(1) Dentre os vários ramos em biologia sistêmica, focamos em processos celulares. A célula é um sistema altamente complexo com um ambiente interno repleto de moléculas e estruturas que apresentam diversas funções, organizadas em redes de reações, trocas e comunicação que promovem a manutenção da célula e suas funções e também seu relacionamento com o ambiente externo. Podemos modelar processos celulares como redes de expressão gênica e síntese proteica, cinética de reações enzimáticas, ativações neuronais, processos de sensoriamento e resposta celular, divisão e diferenciação celular, etc. A modelagem matemática (2) é feita com ferramentas da teoria de sistemas dinâmicos, com a montagem de sistemas caracterizando a evolução temporal e a interdependência dos componentes por meio de equações diferenciais. O procedimento envolve a construção de espaços de fase, com análises de estados estacionários e dependência de condições iniciais, investigação dos diferentes comportamentos do espaço de fase com variação de parâmetros e detalhamento de processos de bifurcação. Também usamos conceitos de cálculo estocástico para a modelagem de ruídos com o tratamento de sistemas dinâmicos envolvendo a evolução de variáveis aleatórias. A estocasticidade é determinante em sistemas biológicos envolvendo um número pequeno de componentes. Atualmente investigamos osciladores biológicos, que são sistemas que permeiam diversos ramos em biologia sistêmica. Os processos biológicos possuem ciclos de funcionamento, buscam a restauração de estados e a repetição de funções, e necessitam ser robustos contra perturbações e ruídos, sendo capazes de manter suas funções. Oscilações representam processos celulares como as variações periódicas de concentrações que executam funções regulatórias na célula, osciladores genéticos, potenciais de ação, ciclos circadianos, etc. Esses osciladores possuem especificidades, tendo a propriedade de manter, além de uma frequência característica, uma amplitude característica. Nos modelos, os osciladores biológicos são ciclos limites e, para isso, a não-linearidade da dinâmica é necessária.(3) Além disso, propriedades biológicas que ajudam a caracterizar os osciladores envolvem processos de feedback negativo, em que um componente atua na inibição de outro componente presente em sua criação; diferentes escalas temporais, com processos lentos e rápidos em diferentes etapas de oscilação; e atrasos temporais, considerando tempos de resposta para feedbacks. Trabalhamos tanto no entendimento desses chamados princípios de design de osciladores e a análise matemática de suas equações quanto na modelagem de oscilações em processos celulares e também de osciladores sintéticos, que buscam a

criação de novas funções celulares entrando na área de biologia sintética.

Palavras-chave: Biologia sistêmica. Sistemas dinâmicos. Osciladores biológicos.

Referências:

1 INGALIS, B. P. **Mathematical modeling in systems biology***:* an introduction. Cambridge: MIT Press, 2013.

2 STROGATZ, S, H. **Nonlinear dynamics and chaos:** with applications to physics, biology, chemistry, and engineering. New York: Westview Press, 2014.

3 ASHWIN, P.; COOMBES, S.; NICKS, R. Mathematical frameworks for oscillatory network dynamics in neuroscience. **Journal of Mathematical Neuroscience, v.**6, n.2, 2016.doi:10.1186/s13408-015-0033-6.

PG7

Fabricação e estudos elétricos de células fotovoltaicas orgânicas

ARAUJO, F. L. de[1]; FARIA, R. M.[1]

franaraujo@usp.br

[1] Instituo de Fisica de São Carlos - USP

Nos últimos anos, o consumo mundial de energia vem crescendo devido aos padrões de vida modernos dos países desenvolvidos, que estão levando a um aumento contínuo da demanda e produção de energia global. Hoje, mais de 80% das fontes de energia usadas pelo homem são oriundas de combustíveis fósseis (petróleo, carvão e gás natural) que são altamente poluentes e são os maiores responsáveis pela emissão de gases do efeito estufa. Neste contexto, a tecnologia fotovoltaica (conversão de energia solar em elétrica) está sendo considerada uma das tecnologias mais viáveis frente à crescente busca por energia limpa e renovável. Os dispositivos fotovoltaicos orgânicos (OPVs – células solares orgânicas) a base de polímeros semicondutores (1), surgem como tecnologia alternativa e promissora para a geração de energia elétrica limpa, renovável e de baixo custo. Os fatores limitantes dessa tecnologia ainda esbarram no tempo de vida útil (2), ainda insuficiente, e na limitada eficiência de conversão (≈11%). (3) Nosso trabalho, tem como objetivo realizar estudos sobre propriedades fundamentais que governam os mecanismos de geração, recombinação, transporte, e também de coleção de cargas pelos eletrodos. Uma melhor compreensão destes fenômenos é de extrema importância para melhorar o desempenho destes dispositivos, bem como, sua estabilidade quando esses dispositivos são expostos em atmosfera ambiente. As OPVs fabricadas nesse trabalho possuem a estrutura do tipo heterojunção de volume (*Bulk Heterojunction* - BHJ) ITO/PEDOT:PSS/PBDTT-FTTE:PC71BM/Ca/Al. Estudamos as propriedades ópticas e morfológicas do filme bifásico que compõe a camada ativa, utilizando as técnicas de espectroscopia de UV-Vis e de AFM (Microscopia de Força Atômica). Os principais experimentos deste trabalho foram realizados com o dispositivo em diferentes condições de funcionamento (diferentes temperaturas e intensidades de sol). Foram eles: medidas de J -V (densidade de corrente por tensão) no escuro e sob iluminação, transiente Foto-CELIV, extração de cargas (CE), fotocorrente transiente (TPC) e fotovoltagem transiente (TPV). Este conjunto de técnicas experimentais nos permitiu calcular os parâmetros macroscópicos necessários para a otimização dos dispositivos fotovoltaicos, estudar os parâmetros microscópicos tais como a mobilidade de carga que é alterada com a variação da temperatura, como também o tempo de vida das cargas fotogeradas para diferentes intensidades do sol. Para explicar as curvas de fotocorrente, utilizamos um modelo teórico desenvolvido no grupo de pesquisa. Com o intuito de investigar os efeitos da ação de moléculas de oxigênio na camada ativa também foram realizadas medidas com o dispositivo exposto ao ambiente. As medidas de J-V mostraram que o dispositivo sofreu uma redução na corrente de curto-circuito e no fator de preenchimento de acordo com o tempo de exposição neste ambiente ocasionando perdas significativas em sua eficiência de conversão. Visando compreender esses fenômenos envolvidos nos mecanismos de transporte devido á interação de moléculas de O_2 com segmentos dos polímeros conjugados, iremos desenvolver uma modelagem analítica. Através das correlações entre as medidas elétricas, ópticas, caracterizações estruturais e modelagem teórica, poderemos identificar com detalhes os fatores que mais influenciam na eficiência e na estabilidade das OPVs.

Palavras-chave: Dispositivos fotovoltaicos orgânicos. PBDTT-FTTE:PC71CM. Eficiência de conversão. Mobilidade de carga e tempo de vida.

Referências:

1 CAO, W.; XUE, J. Recent progress in organic photovoltaics: device architecture and optical design. **Energy ¨"Environmental Science**, v. **7,** p. 2123-214, 2014.doi:10.1039/C4EE00260A.

2 CHENGAC, P.; ZHAN, X. Stability of organic solar cells: challenges and strategies **Chemical Society Reviews**, v.45 , p.2544-2582,2016.doi:10.1039/C5CS00593K.

3 GREEN, M. A. et al. Solar cell efficiency tables (version 50). **Progress in Photovoltaics:** research and applications**,** v. 25, p.668–676,2017.doi:10.1002/pip.2909.

PG8

Estudos das relações entre estrutura e função de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios: em busca de enzimas mais eficientes na depolimerização de biomassa lignocelulósica

ARAÚJO, E. A. de[1]; MANZINE, L. R.[1]; PIIADOV, V.[1]; URIU, M. B.[2]; POLIKARPOV, I.[1]

evandroares@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal do Paraná - UFPR

Inúmeros micro-organismos foram descritos nos últimos anos como capazes de utilizar celulose e hemicelulose como fonte de carbono e energia (1), usando para isto uma complexa maquinaria enzimática capaz de transformar polissacarídeos complexos em açúcares solúveis que podem ser utilizados como produtos de valor biotecnológico, tais como nano carreadores de medicamentos (2) e bioetanol celulósico. (3) Essas enzimas são agrupadas na superfamília das hidrolases de glicosídeos -GHs- com diferentes características, podendo agir na catálise hidrolítica da celulose. As celulases são classificadas em três classes, de acordo com suas atividades: endoglucanases; exoglucanases e; beta-glicosidases. A determinação de estruturas atômicas dos domínios tem trazido importantes informações de como os detalhes estruturais direcionam a função destas enzimas. Entretanto, estruturas intactas são extremamente difíceis de serem obtidos, o que pode está relacionado com a flexibilidade dos domínios e até mesmo a heterogeneidade dos "linkers". Queremos entender os efeitos da modularidade das GHs das famílias 9 e 48, bem como seus efeitos de sinergismo quando atuam na desconstrução da biomassa lignocelulósica. Realizamos a caracterização funcional em diversos substratos e a obtenção de novas estruturas por cristalografia de raios-X de duas celulases das famílias GH9 e GH48 de *Bacillus licheniformis* (*Bl*Cel9 e *Bl*Cel48, respectivamente), como também a caracterização dos perfis hidrolíticos da liberação de açúcares redutores solúveis (ARSol) e insolúveis (ARInsol) da celulose inchada com ácido fosfórico (PASC) e celulose bacteriana. Seus pHs ótimos são 5,5 para *Bl*GH48 e 7,0 para *Bl*GH9 e temperatura de 60 °C para ambas. PASC tem baixo grau de polimerização (237 resíduos de anidroglicose) e ausência de fases cristalinas, enquanto celulose bacteriana apresenta alto graus de cristalinidade (64,5%) e polimerização (2.259 resíduos de anidroglucose). *Bl*Cel48 liberou majoritariamente ARSol ao passo que *Bl*Cel9 liberou uma fração de ARSol e ARInsol. A ocorrência de sinergismo ocorreu apenas em celulose bacteriana com uma taxa sinérgica 7 quando na liberação de açúcares solúveis. Ambas são processivas com processividade aparente de $\sim$6 e $\sim$3, respectivamente, para *Bl*Cel48 e *Bl*Cel9. Tanto para *Bl*GH9 quanto para *Bl*GH48 foram obtidos os modelos em alta e baixa resolução. Três conjuntos de dados cristalográficos foram obtidos para *Bl*GH9. Um apo, um com celobiose e um com celotriose, os quais foram difratados a 2,0 Å e 2,2 Å, respectivamente, para *Bl*GH9-apo e *Bl*GH9 com celobiose e celotriose. Os modelos estruturais em alta resolução compreendem um domínio catalítico e um módulo acessório de ligação à celulose da família 3c. As análises de flexibilidade por SAXS permitiram observar que a temperatura influencia o aumento da flexibilidade enzimática, inicialmente induzindo pequenas movimentações dos domínios, mas com o aumento da temperatura essas mudanças vão se tornando mais

globais. A flexilidade de *Bl*GH9, induzida por pH e temperatura, promove o aumento da coletividade inter-domínios, de tal modo que a aproximação contribui para o aumento da atividade enzimática. Dois conjuntos de dados cristalográficos para *Bl*GH48 foram obtidos e difratados a 1,75 e 1,85 Å, respectivamente. Ambos foram obtidos somente na presença de seu inibidor (celobiose).

Palavras-chave: Enzimas. Modularidade. Hidrolases de glicosídeos.

Referências:

1 MEDIE, F. M. et al. Genome analyses highlight the different biological roles of cellulases. **Nature Reviews Microbiology**, v. 10, n. 3, p. 227-234, 2012.

2 SAWADA, S. I. et al. Self-assembled nanogel of cholesterol-bearing xyloglucan as a drug delivery nanocarrier. **Journal of Biomaterials Science**: polymer edition, v. 28, n. 10-12, p. 1183-1198, 2017.

3 KRACHER, D. et al. Extracellular electron transfer systems fuel cellulose oxidative degradation. **Science**, v. 352, n. 6289, p.1098-1101, 2016.

PG9

Propriedades eletrônicas da cadeia de Fibonacci

ARAÚJO, R. do N.[1]; ANDRADE, E. de C. e[1]

ronaldonasaraujo@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O quase cristal de Fibonacci foi obtido experimentalmente alternando camadas de GaAs e de AlAs com espalhamentos raio-X e Raman evidenciando singularidades no espectro eletrônico. (1) Teoricamente, essa cadeia quase periódica pode ser construída a partir da projeção de pontos em uma rede quadrada rotacionada de um ângulo irracional: tan = 1/g , onde g é a razão dourada. A cadeia resultante segue então o padrão S, L, LS, LSL, LSLLS, LSLLSLSL ... na distância entre seus sítios, com S(L) denominando a distância menor(maior), e com a razão entre L e S tendendo à razão dourada. Seus picos de difração podem ser caracterizados por dois inteiros, em vez de apenas um como no caso período, mostrando que a cadeia de Fibonacci retém a memória de sua construção. Estudamos um modelo tight binding nessas cadeias, considerando dois valores para a amplitude de hopping t_1 e t_2 – associados respectivamente a S e L – com a razão t_1/t_2 assumindo os valores 0.5 e g. O estados eletrônicos obtidos são caracterizados pela alternância de picos de alta densidade de estados e mini-gaps no meio da banda, em contraposição a metais comuns que possuem uma banda suave, à exceção das singularidades de van Hove. Usualmente, é dito que nesse quase cristal todos os estados eletrônicos de partícula única são críticos (isto é, intermediários entre estendidos (metal) e localizados (isolante)). Para caracterizar melhor a natureza dos autoestados eletrônicos dessa cadeia quase periódica, implementamos duas medidas de localização da função de onda: a razão de participação e tensor de localização de Kohn. (2-3) Enquanto a razão de participação foca-se em um único autoestado, e fornece um comportamento dito crítico para todos os autoestados, o tensor de localização captura comportamentos bem distintos: nas vizinhanças dos mini-gaps do espectro os sistema é isolante e longe deles o sistema é metálico. Desse modo, o tensor de localização de Kohn se mostra mais eficiente para a captura das propriedades eletrônicas desse sistema. Por último, discutiremos como explorar essas ideias em dimensões em quase cristais bidimensionais.

Palavras-chave: Fibonacci. Quasecristal. Condução. Lozalização.

Referências:

1 MERLIN, R. et al. Quasiperiodic GaAs-AlAs heterostructures.**Physical Review Letters**, v. 55, p.1768, 1985.doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.1768.

2 KRAVTSOV, V. E.; YUDSON, V. I. Commensurability effects in one-dimensional Anderson localization: anomalies in eigenfunction statistics. **Annals of Physics**, v. 326, n. 7, p. 1672-1698, 2011.

3 RESTA, R.; SORELLA, S. Electron localization in the insulating state. **Physics Review Letters**, v. 82, n. 2, p. 370-373, 1999.

PG10

Cherenkov light production in extensive air showers and hadronic interaction models at CTA energies

ARBELETCHE, L.[1]; SOUZA, V. de[1]

luan.arbeletche@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Measurement of extremely energetic gamma rays (>100GeV) relays on the observation of Cherenkov light produced by Extensive Air Showers (EAS) due to the interaction of such particles with the atmosphere. However, to obtain the correct measurement of the gamma ray flux, it is necessary to separate this component from the most abundant proton background, the latter being roughly three orders of magnitude higher than the former. Such discrimination is usually performed in an event-by-event basis by comparing real observations from Imaging Atmospheric Cherenkov Telescopes (IACT) with simulations of such events. The simulation combines the production of EAS and the response from IACT and subsequent image analysis. Concerning the simulation of extensive air showers, one needs to employ Monte Carlo event generators to describe processes of particle production in such cascades (indeed, at least two models are used together, one for E>80 GeV and another for E<80 GeV). These models are tailored in a phenomenological basis and are constrained to reproduce data from collider experiments. Nevertheless, as there are limitations on collider observations (eg. due to their geometry), such models cannot be tested on the whole phase space available for particle production. Thus, in what concerns gamma ray observations, one expects the presence of systematic uncertainties in the particle discrimination at real experiments due to the choice of a particular model combination for the simulations. (1) As the Cherenkov Telescope Array (CTA) is expected to be at full operation in 2020, a systematic study of the impact of differences between state-of-art hadronic interaction models on interpretation of experimental data becomes indispensable. The CTA experiment is expected to provide measurements covering a wide energy range of four orders of magnitude and an improvement in sensitivity of about one order of magnitude compared to current instruments. Within this scenario, our aim is to provide a comprehensive comparison between results obtained with different state-of-art hadronic interactions models. In particular, we will simulate Cherenkov light production in proton-induced EAS with the CORSIKA (2) software linked to combinations of three choices of high-energy models (EPOS LHC, QGSJET-II and Sibyll 2.3) and three choices of low-energy models (GHEISHA, FLUKA and UrQMD). Next, the telescope response will be simulated with the aid of the sim_telarray (3) software. Both softwares are standards of the CTA collaboration. We will provide results based on the analysis of the Hillas parameters of the images produced in the simulated telescopes as a function of the primary proton energy and distance between the telescope and the shower core. As this work is still in an early phase of production, in this contribution we provide some representative preliminary results.

Palavras-chave: Cherenkov Telescope Array. Gamma-rays. Hadronic interactions.

Referências:

1 BERNLÖHR, K. et al. Monte Carlo studies for the Cherenkov Telescope Array. **Astroparticle Physics**, v. 43, p. 171-188, 2013.doi:/10.1016/j.astropartphys.2012.10.002

2 HECK, D. et al. **CORSIKA:** a Monte Carlo code to simulate extensive air showers. Karlsruhe: Forschungszentrum, Institut fur Kernphysik, 1998. Disponível em: <https://www.ikp.kit.edu/corsika/>. Acesso em: 20/08/2017.

3 BERNLÖHR, K. Simulation of imaging atmospheric Cherenkov telescopes with CORSIKA and sim_telarray. **Astroparticle Physics**, v. 30, p. 149-158, 2008.doi:10.1016/j.astropartphys.2008.07.009

PG11

Purificação e caracterização de biossurfactante produzido por linhagem termofílica de Bacillus isolada de amostra rochosa de reservatório de petróleo

ARGENTIN, M. N.[1]; BOSSOLAN, N. R. S.[1]

marcela.argentin@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes (BS) são compostos tensoativos de baixo peso molecular produzidos por uma ampla variedade de microrganismos. Devido a sua natureza anfifílica, estes compostos são capazes de reduzir a tensão superficial e interfacial entre líquidos, sólidos e gases ou formar emulsões estáveis, o que facilita a homogeneização entre substâncias com diferentes graus de polaridade, além de possuírem alta biodegradabilidade, baixa toxicidade, atividades em extremos de temperatura, pH e salinidade, podendo ser produzidos a partir de fermentação de resíduos agroindustriais. (1) Suas características singulares sugerem vasta aplicação na indústria, com destaque à indústria petrolífera, podendo ser utilizados na biorremediação e dispersão em derramamentos de petróleo, na remoção de resíduos em tanques de estoque, bem como nos processos de recuperação de petróleo melhorada por microrganismos (MEOR). (2) Em MEOR, os biossurfactantes (produzidos *in situ* ou introduzidos no reservatório) auxiliam na remoção do óleo ao reduzir as forças de capilaridade no interior das rochas, facilitando a movimentação do óleo através dos poros das rochas. (3) No entanto, o potencial comercial dessas moléculas não pode ser totalmente explorado devido à falta de processos de purificação que sejam economicamente e ambientalmente viáveis. Neste contexto, este projeto de doutorado propõe o estudo da extração, purificação e caracterização química de um biossurfactante produzido por uma linhagem bacteriana termofílica previamente isolada a partir de amostra rochosa coletada de um reservatório profundo da Bacia de Campos (RJ). Este resumo apresenta os resultados alcançados com os ensaios realizados com a linhagem Ar70C7-2 (*Bacillus* sp) no primeiro ano de desenvolvimento do projeto. O biossurfactante foi produzido a partir de cultivo da bactéria em meio mineral utilizando glicerol e nitrato de amônio como fontes de carbono e nitrogênio, na proporção de 2/1, com 70 g/L de NaCl e incubado a 55 °C em cultivo estático por 6 dias. Após este período, o sobrenadante livre de células teve seu pH ajustado para 2 utilizando HCl 6M, obtendo aproximadamente 2,7 gramas de BS bruto a partir de 10 litros de meio de cultura. O BS bruto foi extraído com clorofórmio seguido de purificação por coluna C18 acoplada ao sistema *Äkta Purifier* (GE Healthcare), produzindo cerca de 19 mg de BS purificado. Com o extrato purificado foram realizados testes para quantificação total de proteína pelo método colorimétrico com ácido bicinóico, usando o kit comercial Pierce® *BCA Protein Assay Kit* (Thermo Fisher Scientific). A espectrometria de massas foi realizada com adição de ácido fórmico utilizando espectrômetro de massas microTOF-QII (Bruker Daltonics). Análise de ácidos graxos foi realizada por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas. Os testes indicaram a presença de 17% de proteína e cadeia de ácido graxo variando de 13 a 18 átomos de carbono, sendo o homólogo C16 o mais abundante. Análise estrutural preliminar indica que o biossurfactante produzido pela linhagem estudada pertence à classe dos lipopeptídeos. As próximas etapas do trabalho incluem a realização do perfil de aminoácidos do BS e nova análise em espectrometria de massas, com intervalo de massas ajustado aos valores identificados

no aminograma. Também serão feitos ensaios de atividade antimicrobiana do BS.

Palavras-chave: Termófilos. Bioemulsificante. MEOR.

Referências:

1 RANDHAWA, K. K. S.; RAHMAN, P. K. S. M. Rhamnolipid biosurfactants: past, present, and future scenario of global market. **Frontiers in Microbiology**, v. 5, p. 454-1-454-7, Sept. 2014. doi: 10.3389/fmicb.2014.00454.

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

3 LESLIE, T.; XIAO, H.; DONG, M. Tailor-modified starch/cyclodextrin-based polymers for use in tertiary oil recovery. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 46, n. 4, p. 225-232, 2005.

PG12

Estudo da angiogênese pós-terapia fotodinâmica em modelo de membrana corioalantoica

ARTHUZO, G.[1]; BUZZÁ, H. H.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

gabriela.arthuzo@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A angiogênese é a formação de novos capilares a partir dos vasos pré-existentes. Este processo está envolvido em fenômenos fisiológicos, mas também está relacionado a diversas doenças e crescimento de tumores. O fator de crescimento endotelial vascular (VEGF) e VEGF receptor 2 (VEGFR-2) são importantes reguladores desse fenômeno. O VEGF estimula a formação e ramificação de novos vasos sanguíneos, promove rápido crescimento tumoral e facilita a metástase. A membrana corioalantoica (chorioallantoic membrane – CAM) possui uma rede vascular que se desenvolve no ovo de galinha e atua como o órgão respiratório do embrião até o momento de sair do ovo. Devido à sua alta vascularização e fácil acesso a esses vasos sanguíneos, a CAM é um modelo adequado para a observação direta dos efeitos vasculares e angiogênicos de diversas terapias. A terapia fotodinâmica (TFD) vem sendo utilizada para o tratamento de várias doenças, sendo uma alternativa aos tratamentos convencionais para o câncer. Esta técnica pode ser realizada nos vasos sanguíneos que nutrem o tumor, levando à destruição deles. Porém, após algum tempo, é observada a recuperação dos vasos, que talvez seja causada por um processo angiogênico induzido pela própria terapia. (1,2) Para avaliar esse efeito pós-TFD, marcadores de angiogênese podem ser usados no modelo de CAM. Assim, foi testado o marcador primário Anti-VEGF Receptor 2 antibody e, como marcador secundário, Goat Anti-Rabbit IgG H¨"L (Allophycocyanin) preadsorbed. O marcador secundário, que é o responsável pela fluorescência, se liga ao primário, que é colocado na superfície da CAM. Um pequeno pedaço da membrana foi retirado e levado para análise em um microscópio confocal de fluorescência, onde as imagens dos vasos sanguíneos foram realizadas. Estes experimentos foram feitos para observar, com o marcador secundário, a angiogênese nos vasos sanguíneos em um grupo controle (em que não foi realizada a TFD). Porém, foi constatado que alguns picos de absorção e de emissão do sangue e do marcador fluorescente eram próximos e, portanto, não foi possível distingui-los através de suas fluorescências. Assim, outros marcadores serão testados de maneira que seja possível avaliar a angiogênese antes e após a TFD. O anticorpo policlonal VEGF (marcador primário) e Alexa Fluor 405 (marcador secundário) serão testados, uma vez que a fluorescência do marcador secundário permitirá a realização das imagens no microscópio, com um máximo de emissão em 421 nm (azul). Uma substância anti-angiogênica conhecida, o anticorpo monoclonal anti-VEGF bevacizumab (Avastin®), será utilizada em combinação com a TFD, possibilitando uma avaliação indireta do efeito angiogênico pós-TFD. Os melhores parâmetros para a aplicação do bevacizumab estão sendo definidos para que ocorra a inibição do crescimento dos vasos sanguíneos da CAM (sem a realização da TFD). Com esses resultados, o bevacizumab será aplicado em combinação com a TFD e, também, com os marcadores. Neste trabalho, o modelo de CAM é adequado para a observação macroscópica e microscópica dos efeitos anti-angiogênicos do bevacizumab, além de permitir a visualização dos marcadores no microscópio confocal.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Angiogênese. Modelo de membrana corioalantoica.

Referências:

1 NOWAK-SLIWINSKA, P. et al.. Vascular regrowth following photodynamic therapy in the chicken embryo chorioallantoic membrane. **Angiogenesis,** v. 13, n.4, p. 281–292, 2010.

2 NOWAK-SLIWINSKA, P.; BALLINI, J-P.; WAGNIÈRES, G.; BERGH, H. Processing of fluorescence angiograms for the quantification of vascular effects induced by anti-angiogenic agents in the CAM model. **Microvascular Research**, v. 79, n. 1, p. 21–28, 2010.

PG13

An unified treatment for shock waves and immersed bodies in fluids

AURICHIO, V. H.[1]; CUCCHIERI, A.[1]; DEOLIVEIRA, M. L. B.[2]

vinicius.aurichio@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

The study of fluids' movements - fluid dynamics - is a problem of interest to many areas since fluids are present in almost every physical system. This is a specially challenging problem, though, because of the non-linear nature of the equations governing fluid dynamics, i.e. the Navier-Stokes equations. An example of complex behaviour arising from these nonlinearities is the formation of shock waves in high-speed flows, a region where properties of the fluid (e.g density and pressure) have steep variations or are discontinuous and effectively become internal boundaries. Rawat and Zhong (1) implemented a good shock fitting scheme by treating shocks as boundaries. A second difficulty is the description of flows for complex geometries. Indeed, real systems, such as turbomachinery or airplanes, have intricate details that must be accounted for during a simulation. A common approach to this problem is to build meshes that exactly match the boundaries of the system. Meshing is a difficult problem by itself and, if the boundaries can move, it is necessary to rebuild the mesh at every time-step. In 1972, seeking an alternative to avoid these problems, Peskin (2) proposed a method in which the solid bodies were described by a set of connected points, while the fluid was described by a fixed Cartesian grid. In our work we extend the method proposed by Karagiozis et. al. (3), which is a variation of Peskin's method, by incorporating the Shockwave description used by Rawat and Zhong. In this way we can handle both interfaces, i.e. those formed by shock waves and by solid bodies, using a single method.

Palavras-chave: Computational fluid dynamics. Immersed interface methods. Shock fitting.

Referências:

1 RAWAT, P. S.; ZHONG, X.On high-order shock-fitting and front-tracking schemes for numerical simulation of shock–disturbance interactions, **Journal of Computational Physics**, v.229, n.19, p.6744-80,2010.2010.

2 PESKIN, C. Flow patterns around heart valves: a numerical method. **Journal of Computational Physics**, v. 10, n.2, p.252-71,1972.doi: 10.1016/0021-9991(72)90065-4.

3 KARAGIOZIS, K.; KAMAKOTI, R.; PANTANO, C. A low numerical dissipation immersed interface method for the compressible Navier-Stokes equations.**Journal of Computational Physics,**v.229, n.3, p.701-727, 2010.doi: 10.1016/j.jcp.2009.10.005.

PG14

Estudos estruturais e funcionais da enzima MnaA de Staphylococcus aureus

AZEVEDO, É. C. de[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]

erika.chang.azevedo@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, a bactéria *Staphylococcus aureus* é uma das principais causas de infecções hospitalares em todo o mundo. A principal dificuldade encontrada no tratamento destas infecções é a aquisição de resistência a antibióticos, em especial aos beta-lactâmicos. Um método que tem se mostrado eficaz no combate a esta resistência é a combinação de fármacos durante a terapia. (1) Em *S. aureus*, que são bactérias gram-positivas, um alvo interessante para este tipo de estratégia são enzimas envolvidas na via de síntese da parede de ácidos teicóicos. A inibição de algumas destas enzimas mostrou re-sensibilizar bactérias resistentes, porém o mecanismo pelo qual isto ocorre ainda não está completamente elucidado. (2) Portanto, estudos funcionais e estruturais destas enzimas se mostram de grande importância para o conhecimento sobre seus mecanismos moleculares de ação na síntese do polímero, possibilitando também a procura por moléculas inibidoras que possam ser utilizadas durante a terapia, combinadas aos compostos beta-lactâmicos. Foram realizados experimentos com a enzima MnaA, presente nos primeiros passos da biossíntese do polímero de ácido teicóicos e cuja deleção mostrou sensibilizar culturas resistentes. (3) Esta enzima foi clonada, utilizando-se o DNA genômico oriundo da cepa SA16 de *S. aureus*, no vetor pETTRX-1a/LIC e transformada em bactérias *Escherichia coli* para que fosse realizada sua expressão heteróloga. Foram realizados testes de solubilidade utilizando diferentes concentrações do detergente Triton X-100, porém a amostra se mostrou pouco solúvel. A proteína MnaA, possui sua estrutura tridimensional elucidada, tendo sido simulada em sua forma monomérica, com e sem ligantes UDP e UDP-N-acetilglicosamina, utilizando técnicas de dinâmica molecular de equilíbrio, acelerada pela adição de um potencial harmônico (GaMD) e metadinâmica. Estes experimentos foram realizados para a elucidação dos movimentos de abertura e fechamento realizados pela enzima. A partir dos resultados obtidos até o momento, é possível concluir que há um equilíbrio dinâmico entre os estados aberto, intermediário e fechado da proteína, sendo deslocado para as conformações fechada e intermediária pela ligação do substrato UDP-N-acetilglicosamina. Se encontram em andamento novas simulações de dinâmica molecular para a análise da influência do ligante UDP na movimentação da proteína. Além disso, serão realizados experimentos de docagem molecular afim de que se obtenham possíveis compostos inibitórios. Para que sejam realizados experimentos de medição da atividade e inibição *in vitro*, são necessários também novos experimentos para a produção de uma amostra solúvel.

Palavras-chave: MRSA. Dinâmica molecular. GaMD. Metadinâmica. Parede de ácidos teicóicos.

Referências:

1 BROWN, E. D.; WRIGHT, G. D. Antibacterial drug discovery in the resistance era. **Nature**, v. 529, n. 7586, p. 336–343, 2016.

2 SOBHANIFAR, S. et al. Structure and mechanism of *Staphylococcus aureus* TarM, the wall teichoic acid —glycosyltransferase. **Proceedings of the National Academy of Sciences**,v.112, n.6, p. 1–10, 2015.

3 MANN, P. A. et al. Chemical genetic analysis and functional characterization of *Staphylococcal* wall teichoic acid 2-epimerases reveals unconventional antibiotic drug targets. **PLOS Pathogens,** v. 12, n. 5, p. 1–26, 2016.

PG15

Retratando o perfil motivacional de alunos de cursos de física

BADAN, L. da C.[1]; ALMEIDA, N. S. de[1]; QUIBAO, M. P.[1]; NAZARIO, N. R.[1]; SILVA, A. C.[1]; SILVA, R. M. A. A.[1]; MUNIZ, S. R.[1]; PAIVA, F. F.[1]

larissa.badan@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Há muitas décadas ocorrem estudos sobre como a motivação influencia na aprendizagem e os resultados mostram, por exemplo, que a falta de motivação influencia negativamente o desempenho escolar. (1) Logo, é de extrema importância compreender e analisar os perfis motivacionais dos estudantes no processo de ensino-aprendizagem. Uma das teorias que nos auxilia na compreensão da motivação é a Teoria da Autodeterminação, que relata que tanto o ambiente como o indivíduo são mutuamente influenciados positiva ou negativamente, fazendo com que o estudante transite pela chamada linha do continuum. (2) Esta se divide por motivações intrínsecas, que são inerentes ao próprio indivíduo e autônomas, motivações extrínsecas, que se devem às influências externas do ambiente, e desmotivação, que ocorre quando este não se move em direção a nenhum objetivo direto. Pensando na importância do estudo da motivação para o processo de aprendizagem dos alunos, o presente trabalho retrata o perfil motivacional de 278 alunos dos cursos superiores do Instituto de Física de São Carlos (IFSC) e analisa a existência da relação deste perfil com desempenho acadêmico e classificação socioeconômica. Para avaliação do perfil motivacional dos alunos, utilizamos a Escala de Motivação Acadêmica (EMA), criada por Vallerand em 1992 e traduzida para o português por Sobral em 2003. (3) Trata-se de um questionário do tipo que possui uma única pergunta - "porque venho à universidade?" – seguida de múltiplas respostas para as quais os alunos atribuem, utilizando uma escala likert, o grau de correspondência com sua situação atual. O perfil socioeconômico dos alunos foi avaliado através do Critério de Classificação Econômica, o qual se baseia em posse de bens, condições básicas de saneamento e mobilidade, atrelando a cada item uma quantidade de pontos. Ao final do semestre da coleta, solicitamos aos alunos as médias ponderadas considerando as reprovações, que foi utilizada como indicador de desempenho acadêmico. Através do perfil sócio-econômico e desempenho acadêmico, analisamos a correlação destes com o perfil motivacional da amostra descrita. A análise da EMA possibilitou a construção dos gráficos para identificar o perfil motivacional dos alunos para cada curso do IFSC, que demonstraram perfis motivacionais semelhantes, mas com diferentes intensidades para cada nível motivacional. Ao analisar os dados de maneira global, notou-se que o maior nível motivacional encontrado entre os alunos investigados foi a motivação intrínseca para o conhecimento, que é o tipo de motivação com maior grau de autonomia dentro da linha do continuum, seguida por motivação extrínseca por identificação. Já o nível menos presente ficou entre motivação intrínseca para experiência e motivação intrínseca para realização. Quanto à correlação entre o perfil socioeconômico e o perfil motivacional, a análise mostrou que não existe correlação estatística significativa, enquanto que ao analisarmos a relação entre motivação e desempenho acadêmico, a única motivação que obteve correlação estatisticamente relevante foi a motivação extrínseca por introjeção. Esperamos através dos nossos resultados contribuir com os avanços nas pesquisas sobre motivação no ensino superior e que essas se ampliem para que possamos compreender melhor a relação entre motivação no ensino e sua influência na aprendizagem.

Palavras-chave: Motivação. Ensino superior. Ensino de física.

Referências:

1 BZUNECK, J. A. O esforço nas aprendizagens escolares: mais do que um problema motivacional do aluno. **Revista Educação e Ensino**, v. 6, n. 1, p. 7-18, 2001.

2 DECI, E. L.; RYAN, R. M. The general causality orientations scale: self-determination in personality. **Journal of Research in Personality**, v. 19. n. 2, p. 109-134, 1985.

3 SOBRAL, D. T. Motivação do aprendiz de medicina: uso da escala de motivação acadêmica. **Psicologia**: teoria e pesquisa, v. 19, n. 1, p. 25-31, 2003.

PG16

Otimização de modularidade baseada em caminhadas auto-excludentes

BAGNATO, G. de G.[1]; RONQUI, J. R. F.[1]; TRAVIESO, G.[1]

gui.bagnato@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Diferentes tipos de caminhadas aleatórias tem-se mostrado muito úteis no estudo de propriedades estruturais de redes complexas. Entre elas, a caminhada auto-excludente (SAW), que atinge apenas vértices não visitados no mesmo passeio, destaca-se pela eficiente exploração das redes. Portanto, o SAW se tornou uma ferramenta promissora na identificação de estruturas de comunidades. Apesar de sua importância, detecção de comunidades permanece um problema em aberto devido à alta complexidade computacional associada ao problema de optimização além da falta de uma definição formal do significado de comunidade. (1) Neste trabalho, propomos um método de detecção de comunidades baseado no SAW para extrair uma estrutura de comunidades da rede otimizando o parâmetro modularidade. (2) Combinamos características extraídas desta dinâmica com a análise de componentes principais para posteriormente classificar os vértices em grupos por meio da clusterização hierárquica aglomerativa, definindo como métrica a dissimilaridade de Bray-Curtis e como critério de união dos conjuntos o average linkage (UPGMA). Para avaliar a performance deste novo algoritmo, comparamos os resultados com outros três métodos populares de optimização de modularidade: Girvan-Newman, Fastgreedy e Walktrap, aplicados em dois tipos de redes sintéticas (3) e seis redes reais bem conhecidas. Para os benchmarks, esta nova técnica produziu resultados satisfatórios em diferentes combinações de parâmetros como tamanho de rede, distribuição de grau e número de comunidades. Já para as redes reais, obtivemos valores de modularidade superior aos métodos tradicionais, indicando uma distribuição de grupos mais adequada a realidade. Os próximos passos deste trabalho consistem na generalização do algoritmo para redes com peso e direção, assim como determinar comunidades individuais através da exploração local característica do SAW. Outra possibilidade é adaptar o novo método para melhor compreensão do impacto dos metadatas na estrutura de comunidades.

Palavras-chave: Caminhada aleatória. Redes complexas. Comunidades.

Referências:

1 FORTUNATO, S. Community detection in graphs. **Physics Reports**, v. 486, n. 3-5, p. 75-174, 2010.

2 NEWMAN, M. E. J. Modularity and community structure in networks. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 103, n. 23, p. 8577-8582, 2006.

3 LANCICHINETTI, A.; FORTUNATO, S. RADICCHI, F. Benchmark graphs for testing community detection algorithms. **Physical Review E**, v. 78, n. 4, p. 046110-1-046110-5, 2008.

PG17

Mixed state metrology with non-Hermitian Hamiltonians

BARRETO, D. L.[1]; SOARES-PINTO, D. de O.[1]

diogolbar@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

We investigate the possible enhancements through the implementation of a PT-Symmetric Hamiltonian (1) on different quantum parameter estimation (2) strategies that possess high precision for the standard Hermitian case. (3) We analyze a two and three qubit system which are initially in a mixed state and are afterwards prepared using a standard strategy of repeated single-qubit measurements, a classical strategy that allows for classical correlations, and two quantum strategies that give rise to nonclassical correlations. We compare the efficiency of these strategies with the Hermitian cases as a function of the Hamiltonian parameters and the same amount of mixedness.

Palavras-chave: Quantum metrology. PT symmetry. Quantum information.

Referências:

1 CROKE, S. PT-symmetric Hamiltonians and their application in quantum information. **Physical Review A**, v. 91, n. 5, p. 052113, 2015

2 PARIS, M. G. A. Quantum estimation for quantum technology. **International Journal of Quantum Information**, v. 7, p. 125-137, 2009. Supplement 1.

3 MODI, K. et al. Quantum correlations in mixed-state metrology. **Physical Review X**, v. 1, n. 2, p. 021022, 2011

PG18

Theoretical study of transition metal dichalcogenides: stability energy, structural and electronic properties

BASTOS, C. M. de O.[1]; SABINO, F. P.[2]; BESSE, R.[1]; SIPAHI, G. M.[1]; SILVA, J. L. F. da[3]

cmobastos@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] College of Engineering - University of Delaware

[3] Instituto de Química de São Carlos - USP

The success of graphene isolation was a beginning of a new era in the study of 2D materials. In contrast to graphene, transition metal dichalcogenides (TMDCs) materials present a wide spectrum of phenomena, e.g., magnetism, topological insulators, charge density wave, among others, which increase the range of applicability of 2D materials. Although all those properties can be obtained, there is no clear recipe yet that provides a route to designing layered TMDCs with particular properties. Also, despite the impressive number of papers about TMDCs published in the last five years, their majority involve only a small group of alloys, such as Mo and W combined with S, Se, and Te. However, other TMDC materials may have potential application in new devices. In this work, we report density functional theory (DFT) calculations including van der Waals corrections for nine different TMDC compounds, in two crystalline phases, namely, employing the combination of Zr, Nb, and Mo with S, Se, and Te. Initially, we addressed the stability of the compounds, finding that Zr compounds prefer to crystallize in the phase 1-T, Mo in the phase 2-H and Nb in both phases. This behavior was observed experimentally and depends predominantly on the d-electrons of the transition metals and on the atomic sizes. (1) We have also identified trends between the most stable phase and the length of the chemical bonds. Other structural properties such as the equilibrium volume and the magnetic order were also addressed. In a second step, we investigated the electronic properties using the hybrid functional HSE06 (2) to obtain a correct description of the gap. We classified the compounds by their electrical transport character (insulator, semiconductor, etc.), addressing the importance of the d-band in this analysis. In conclusion, we performed an exploratory study of the TMDC properties that leads to an increase of the understanding of this class of materials, providing auxiliary information that can be used to identify candidate materials for new applications

Palavras-chave: TMDCs. DFT. 2D materials.

Referências:

1 KOLOBOV, A. V.; TOMINAGA, J. **Two-dimensional transition-metal dichalcogenides**. Cham, Switzerland: Springer International Publishing , 2016. (Springer Series in Materials Science).

2 HEYD, J.; SCUSERIA, G. E.; ERNZERHOF, M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. **Journal of Chemical Physics**, v. 118, n. 18, p. 8207-8215, 2003.

PG19

Abordagem histórico-investigativa: limites e contribuições em aulas de física

BATISTA, R. da F. M.[1]; SILVA, C. C. [1]

tata.fis@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Ao longo das últimas décadas, alternativas metodológicas e curriculares ao chamado ensino tradicional têm sido discutidas por pesquisadores da área de ensino de ciências. Entre as várias alternativas há a chamada abordagem histórico-investigativa. (1) Essa abordagem surgiu da fusão do ensino investigativo (EI) com a história, filosofia e sociologia da ciência (HFSC). A abordagem histórico-investigativa (HI) assim como o EI (2), visa o aluno ser o protagonista da construção de seu conhecimento dentro da sala de aula e o professor atuando como um facilitador do processo. O aluno irá, através de uma questão problematizadora, investigar, refletir, pensar, criar hipóteses e ideias para solucionar o problema, observar, argumentar, discutir, planejar e testar as hipóteses experimentalmente, coletar dados e concluir sobre tal problema. Auxiliando neste processo há a HFSC, contextualizando o problema através de uma narrativa histórica contribuindo para o processo de ensino e aprendizagem do aluno ao ensinar conceitos científicos e procedimentos típicos da atividade científica de uma forma mais crítica e evitando uma visão distorcida da ciência. (3) Inserir essa abordagem dentro da sala de aula não é trivial para o professor que deve possuir um conhecimento de história da ciência, saber utilizar os dados históricos, deter de procedimentos e métodos inerentes da prática científica além de lecionar através da abordagem investigativa, distanciando-se assim do ensino tradicional. Para que isso ocorra vários fatores estão envolvidos além dos inerentes à escola e sua organização. Dessa forma este trabalho discute alguns limites e também as contribuições envolvidas na inserção da abordagem histórico-investigativa em uma aula de física do ensino médio. Como ponto de partida elaboramos através da abordagem HI, novos roteiros para os kits experimentais de física pertencentes à Experimentoteca do Centro de Divulgação Científica e Cultural da Universidade de São Paulo (CDCC-USP – localizado na cidade de São Carlos) e aplicamos em sala de aula com professores usuários desses kits experimentais. Os professores que atuam na rede pública de ensino participam ativamente na elaboração dos roteiros de forma a agregar o conhecimento pedagógico do professor em todo o processo de elaboração dos roteiros e aplicação desta nova abordagem em sala de aula. Deste modo, a metodologia de pesquisa utilizada é do tipo Design Based Research (DBR) baseada na colaboração entre os professores e os pesquisadores com o intuito de integrar a pesquisa com o desenvolvimento de intervenções educativas em ambientes de aprendizagem.

Palavras-chave: Abordagem histórico-investigativa. Atividades experimentais. Ensino de física.

Referências:

1 CARVALHO, A. M. P. O ensino de ciências e a proposição de sequências de ensino investigativas. In: CARVALHO, A. M. P. (Org). **Ensino de ciências por investigação**: condições para implementação na sala de aula. São Paulo: Cengage Learning, 2013. p. 1-20.

2 HEERING, P.; HÖTTECKE, D. Historical-investigative approaches in science teaching. In: MATTHEWS, M. R. **International handbook of research philosophy and science teaching**.Holanda: Springer Verlag, 2014. p. 1473-1502.

3 MATTHEWS, M. R. **Science teaching**: the role of history and philosophy of science. New York: Routledge, 1994. 296 p.

PG20

Free-living amoebae occurrence in freshwater samples of São Carlos, São Paulo, Brazil

BELLINI, N. K.[1]; FONSECA, A. L. M. da[1]; THIEMANN, O. H.[1]

nkbellini@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Free-living amoebae (FLA) are protists that have a broad worldwide distribution and are recovered from soil and freshwater samples. The most featured genres are *Naegleria, Acanthamoeba, Sappinia* and *Balamuthia* due to their capability of causing opportunistic and non-opportunistic infections that afflict humans. (1) The disturbs of the nervous system are critical since they lead to victims' death in few days since the first symptoms appearance, hampering the diagnosis' chances. (2) The Primary Amoebic Meningoencephalitis (PAM) evoked by *Naegleria fowleri* depicts this concern about FLA because of its brain impairment which has been fatal in more than 95% of the cases. (3) Although this alarming risk, there is a lack of FLA's occurrence reports from South America in populated areas, aggravated by a rare attention by the public health system towards this. Besides an underestimation in the number of PAM cases reported due to the difficulty in obtaining an accurate diagnosis. Thus, this project aims to evaluate the environmental occurrence of FLA protists in a public freshwater in the city of São Carlos, São Paulo, called Monjolinho river, taking into account the narrow relation among the urbanization and the water sources usage. The developed methodology can be divided into four steps: collection of FLA in five different areas of the river; morphological analyses; molecular analyses, both at the Structural Biology Laboratory of the Physics Institute of São Carlos (LBEst, USP); and limnological water characterization, conducted together with the Limnology Laboratory of the Federal University of São Carlos (UFSCar). Regarding the first step, one liter of water has been collected, in triplicate, at each point and split into two 500 ml samples: one for the morphological analyses and another for the molecular one. Positive controls were carried out by seeding 500 ml of extra water with *Naegleria gruberi* strain, previously grown under axenic conditions. For in vivo approach, 500 ml of water has been sifted, filtered through a 0.45 m membrane, and the organisms attached on the membrane have been cultivated in non-nutrient agar (NNA) plates. Three temperatures (26, 37 and 44° C) were used as thermotolerance assays considering the different temperatures each species can withstand. Monitoring the culture growth on NNA plates amoeba cells could be observed in all the five areas collected, when the cultures were maintained under 26°C. As a complementary in vitro analysis, 500 ml of river water has been centrifuged and suspended with 500 μL of TE buffer. The next intended steps with each sample are: the total DNA extraction and the PCR using a set of *Naegleria* specific primers, which frequently amplify the 18S region of the rDNA, known a region of interest to recognise individual genotypes and potential new species. Once obtained the amplicons from the PCR, a sequencing step will be conducted and the species will be determined using bioinformatics tools. The expected findings on this FLA investigation are of great importance since they have the potential to reveal pathogenic species encountered in fresh water of urban environment.

Palavras-chave: Free-living amoeba. Naegleria fowleri. Monjolinho river. São Carlos. São Paulo.

Referências:

1 VISVESVARA, G.S.; MOURA, H.; SCHUSTER, F.L. Pathogenic and opportunistic free-living amoebae: Acanthamoeba spp., Balamuthia mandrillaris , Naegleria fowleri , and Sappinia diploidea. **FEMS Immunology Medical Microbiology**, v. 50, p.1–26.2007. doi:10.1111/j.1574-695X.2007.00232.x.

2 CHOW, F.C.; GLASER, C.A.. Emerging and reemerging neurologic infections. **Neurohospitalist** v.4, n.4,p.173–84,2014.. doi:10.1177/1941874414540685.

3 TRABELSI, H.et al. Pathogenic free-living amoebae: epidemiology and clinical review. **Pathologie Biologie**. v.60, p.399–405,2012. doi:10.1016/j.patbio.2012.03.002

PG21

Algoritmo de reconhecimento de padrões em eventos do observatório Pierre Auger

BENATTI, A.[1]; SOUZA, L. V. de[1]

alexandre.benatti@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os detectores de superfície do observatório Pierre Auger (1) são tanques repletos de água e completamente escuros com sensores fotomultiplicadores instalados na parte interna. Quando as partículas carregadas, de chuveiros atmosféricos, atravessam os tanques com velocidade acima da luz na água geram radiação ultravioleta devido ao efeito Cherenkov. (2) Os sensores fotomultiplicadores do tanque medem e convertem essa radiação em sinais elétricos que são enviados para a central de dados, registrando assim um evento. Alguns eventos apresentam comportamento incomum, não reproduzido por simulações. Estes sinais se caracterizam por possuir mais de um pico, bastante acima do nível esperado de ruído, coincidindo em pelo menos dois tanques na evolução temporal do sinal registrados. Devido ao grande número de dados registrados pelo Observatório Pierre Auger foi preciso desenvolver uma ferramenta computacional que permita reconhecer e selecionar aqueles que apresentam o tipo de estrutura desejadas. Nesse trabalho, escrevi um algoritmo de reconhecimento de padrões para indicar quais eventos apresentam tanques com o sinal característico desejado e assim identificar os eventos de interesse. Após esse filtro, tentei caracterizar esse padrão buscando semelhanças ou tendências em variáveis desses chuveiros como a energia e a direção de chegada, porém nenhum padrão foi encontrado. Em seguida olhei para eventos híbrido, eventos observados pelos tanques e pelos telescópios de fluorecência simultaneamente, afim de analisar o desenvolvimento longitudinal do chuveiro, mas nada que possa explicar o sinal incomum foi encontrado. O próximo passo é simular a resposta do observatório para os eventos encontrados, com a ideia de determinar se a origem desses sinal anômalo está nos detectores.

Palavras-chave: Reconhecimento de padrões. Selecionar eventos. Pierre Auger.

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 A**, v. 523, p. 50-95, 2004. doi: 10.1016/j.nima.2003.12.012.

2 THOMSON, M. **Modern particle physics**. New York: Cambridge University Press, 2013. 554 p.

PG22

Relative stability of octahedral and trigonal prismatic phases of MoSe2 flakes from density functional theory calculations

BESSE, R.[1]; CATURELLO, N. A. M. S.[2]; BASTOS, C. M. de O.[1]; GUEDES-SOBRINHO, D.[2]; LIMA, M. P.[3]; SIPAHI, G. M.[1]; SILVA, J. L. F. da[2]

rafael.besse@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química de São Carlos - USP

[3] Departamento de Física - UFSCar

Nowadays, transition metal dichalcogenides (TMDs), materials with chemical formula MQ_2 (M = transition metal; Q = S, Se, Te), are among the most promising two-dimensional materials, being widely studied due to the unique physical properties and phenomena they exhibit. (1-2) Each layer in a TMD crystal structure is composed by one plane of M atoms sandwiched between two planes of Q atoms, and two different coordination environments, namely, trigonal prismatic (1H), and octahedral (1T), define two distinct structural phases. (1) This structural variety generates important consequences in the materials properties, for example, MoSe2 presents a semiconductor behavior in the 1H configuration, which is the most energetically stable, whereas a metallic behavior occurs for the 1T structure. Therefore, there is a great interest in understanding and controlling the mechanisms of relative stability between these two TMD phases. (3) In this work, we investigated the relative stability of octahedral and trigonal prismatic MoSe2 flakes, ranging from 15 (45) to 192 (576) formula units (atoms), by means of density functional theory calculations. We found that the structure size has an important effect on the relative energy between 1T and 1H structures, and that the 1T phase becomes more stable for small sized flakes. The 1T structure has a preference to adopt a distorted configuration, which can be explained by Peierls transition, and such distortion has an important contribution to increase the stability of this phase. In contrast, the 1H flakes exhibit only significant reconstructions on their edges and lower decreases of energy from reconstructions compared with 1T. Our findings contribute to obtain a deeper understanding of the phase transitions in TMDs.

Palavras-chave: Transition metal dichalcogenides. Two-dimensional materials. Density functional theory.

Referências:

1 CHHOWALLA, M. et al. The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenides nanosheets. **Nature Chemistry**, v. 5, n. 4, p. 263-275, 2013.

2 NOVOSELOV, K. S. et al. 2D materials and van der Waals heterostructures. **Science**, v. 353, n. 6298, p. aac9439-1-aac9439-11, 2016.

3 DUERLOO, K.-A. N.; LI, Y.; REED, E. J. Structural phase transitions in two-dimensional Mo- and W-dichalcogenide monolayers. **Nature Communications**, v. 5, p. 4214-1-4214-9, 2014. doi: 10.1038/ncomms5214.

PG23

Clock generator subsystem for MRI

DE BITTENCOURT, H. P.[1]; VIDOTO, E. L. G.[1]; TANNÚS, A.[1]

heitorpbittencourt@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Nuclear Magnetic Resonance experiments need very sensitive equipment to detect very weak signals among very intense ones. To achieve this, the transceiver must have a dynamic range greater than 80 dB. Also, the module providing the clock signals to the system must have ∼10 ppb of stability and phase noise better than -80 dBc/Hz at 1 kHz offset. The first part of this work focused on the clock generating module for an 85 MHz (2.0 T magnet) spectrometer. This module has two output signals: a 50 MHz clock for the FPGA and A/D converters and a 90 MHz reference clock for the up/down converter mixers. The intermediate frequency in this system is 5 MHz and the transceiver operates on lower sideband modulation (L.S.B./U.S.B.). To avoid spurious oscillations in both outputs, the two clock signals have the same source. The output of a 20 MHz OCXO passes through a frequency divider to become symmetrical. Then it is differentiated to generate all the harmonics of 10 MHz up to ∼2 GHz. (1) Two high-Q filters select the desired frequencies before the amplifying stage. The 5th harmonic for 50 MHz and the 9th one for 90 Mhz.

Palavras-chave: MRI. Instrumentation. Clock generator.

Referências:

1 WYATT, K. **Harmonic comb generators are useful tools.** 2015. Disponivel em: <https://interferencetechnology.com/harmonic-comb-generators-are-useful-tools/>. Acesso em: 28 ago.2017.

PG24

Study of Majorana leakage on quantum dots

BIRAL, E. J. P.[1]; EGUES, J. C.[1]; CRUZ, A. R.[1]; PENTEADO, P. H. [1]; VERNEK, E.[2]

eliasbiral@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física - UFU

Majorana Fermions (1) have been extensively investigated in condensed matter systems. In particular, the leakage of Majorana modes into a quantum dot has been studied by considering a setup consisting of spinless (2) and spinfull (3) quantum dots connected to a Kitaev chain. In this work, we look at a spinless quantum dot coupled to two topological nanowires, i.e., Kitaev chains. By using a recursive Green's function approach we show that it is possible to control the splitting of Majorana modes within the dot by tuning some physical parameters of the system, e.g., the gate voltage. This work is supported by FAPESP, Capes and CNPq.

Palavras-chave: Majorana Fermions. Quantum dot. Quantum computing.

Referências:

1 ALICEA, J. New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems. **Reports on Progress in Physics**, v. 75, n.7, p. 076501-1-076501-36, 2012.

2 VERNEK, E. et al. Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. **Physical Review B**, v. 89, n. 16, p.165314-1-165314-5, 2014.

3 RUIZ-TIJERINA, D. A. et al. Interaction effects on a majorana zero mode leaking into a quantum dot. **Phsysical Review B**, v. 91, n. 11, p. 115435-1-115435-17, 2015.

PG25

Estudo do envolvimento da RNA helicase Sub2 na reação de *splicing* em *Trypanosoma brucei*

BORALLI, C. M. S.[1]; DA SILVA, M. T. A.[1]; THIEMANN, O. H.[1]

camila.boralli@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A excisão de sequencias intrônicas por precursores de mRNAs é um passo crítico durante a expressão gênica eucariótica. Essa reação é catalisada pelo complexo macromolecular denominado spliceossomo, composto por partículas ribonucleoproteicas nucleares (U1, U2, U4/U6, U5 snRNPs), além de inúmeros fatores associados. Em tripanossomatídeos, os genes são transcritos em longas unidades policistrônicas e a reação de *trans-splicing* é requerida para geração de transcritos monocistrônicos maduros, onde um pequeno miniéxon não codificante, conhecido como *spliced leader* (SL) RNA é adicionado a cada éxon. (1) O spliceossomo é uma maquinaria altamente dinâmica e parte das mudanças conformacionais ocorrida neste complexo é mediado por RNA helicases. A proteína RNA helicase/ATPásica Sub2 (em mamífero, UAP56), cujas homólogas foram descritas como membros do complexo TREX (transcrição/exportação do RNA) é essencial na montagem do pré-spliceossomo, apesar de estudos sugerirem sua participação em outras etapas de montagem do splicesossomo. Em tripanossomas, este membro teve sua função no transporte núcleo/citoplasma descrita, entretanto, seu envolvimento na reação de splicing permanece obscura. (2-3) Até o momento foi possível estabelecer protocolos de expressão heteróloga e purificação da proteína, bem como realizar experimentos para avaliar estado oligomérico e estabilidade da mesma. A purificação em tandem possibilitou a copurificação de parceiros de interação da helicase que serão identificados por espectrometria de massas. Além disso, demonstrou-se que o silenciamento do gene de Sub2 leva à morte das culturas de parasitas nas formas sanguíneas e pró-ciclica. Experimentos futuros de qPCR possibilitarão a análise da redução do mRNA do respectivo gene silenciado, além de RT-PCR semi-quantativa para avaliar potenciais defeitos de *splicing* decorrentes do silenciamento do gene de interesse e a análise por *primer extension* para avaliar influência do silenciamento sobre snRNAs e SL RNA. Por fim, será realizada a imunolocalização de Sub2 pela técnica de Imunofluorescência Indireta (IFI), bem como ensaios de atividade e cristalização da proteína obtida através de expressão heteróloga.

Palavras-chave: Tripanossomíases.*trans-splicing*.RNA helicase.

Referências:

1 GÜNZL, A. The pre-mRNA splicing machinery of trypanosomes: complex or simplified? **Eukaryotic Cell**, v. 9, n. 8, p. 1159-1170, 2010. doi: 10.1128/EC.00113-10.

2 SERPELONI,M. et al. An essential nuclear protein in trypanosomes is acomponent of mRNA transcription/export pathway. **PLoS One**, v.6, n.6, p.e20730, 2011.doi: 10.1371/journal.pone.0020730.

3 LIBRI, D et al. Multiple roles for the yeast SUB2/yUAP56 gene in splicing. **Genes ¨"Development,**

v. 15, n.1, p. 36–41, 2001. doi: 10.1101/gad.852101.

PG26

Estudos de relações entre estrutura e função de Xilose Isomerase

BRIGANTI, L. E. R. P. P. L. D. B.[1] ; POLIKARPOV, I.[1]

lorenzo_briganti@outlook.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A indústria sucroalcoleira, apesar de tradicional e bem-estabelecida, em especial no Brasil, vem enfrentando uma série de desafios. A produção brasileira praticamente estagnou desde 2008, por diversos motivos: Quebra de safra, queda dos preços e limitações operacionais. Em relação a esse último ponto, podemos ressaltar a limitação causada pela matéria-prima (cana-de-açúcar), onde 1 tonelada de cana gera, aproximadamente, 90 L de etanol e 280 Kg de bagaço. Apesar de existirem pesquisas de melhoramento genético do vegetal para aumentar a produção de caldo, o bagaço produzido continua sendo sub-aproveitado na indústria. (1) Uma das estratégias propostas seria a produção de Etanol de 2ª geração, ou seja, produzido à partir de sobras da produção primária (como bagaço, palha e pontas do vegetal). No bagaço, por exemplo, cerca de 28% da sua constituição é hemicelulose, cujo composto majoritário é a xilose. (2) A Xilose é uma aldose que não é fermentada naturalmente por *Saccharomyces cerevisiae*. Isto significa que é necessária a conversão de Xilose a Xilulose (Cetose) para que a fermentação ocorra. Essa conversão se dá através da enzima Xilose Isomerase (XI), presente em diversos organismos. O objetivo do presente estudo é identificar e caracterizar Xis de relevante interesse industrial, ou seja, de pH e temperatura ótimos com valores semelhantes ao encontrado no processo produtivo agroindustrial. Além disso, elas serão caracterizadas bioquimicamente e estruturalmente. (3) Além disso, será feita a imobilização dessas enzimas, para viabilizar a reciclagem das mesmas. Vale ressaltar que o fato de utilizar as enzimas imobilizadas constitui uma vantagem em relação à utilização de Organismos Geneticamente Modificados (OGMs), pois não se aplica qualquer barreira regulatória, uma vez que as leveduras utilizadas no processo serão as mesmas já utilizadas pela indústria.Além disso, será feita a imobilização dessas enzimas, para viabilizar a reciclagem das mesmas. Vale ressaltar que o fato de utilizar as enzimas imobilizadas constitui uma vantagem em relação à utilização de Organismos Geneticamente Modificados (OGMs), pois não se aplica qualquer barreira regulatória, uma vez que as leveduras utilizadas no processo serão as mesmas já utilizadas pela indústria.

Palavras-chave: Xilose Isomerase. Etanol de 2ª geração.

Referências:

1 RENEWABLE FUELS ASSOCIATION. Disponível em: <www.ethanolrfa.org>. Acesso em: 20 junho /2017.

2 REZENDE, C. A. et al. Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility. **Biotechnology for Biofuels, v.** 4,n.54,2011.doi:.org/10.1186/1754-6834-4-54

3 ASBÓTH, B.; NÁRAY-SZABÓ, G. Mechanism of action of D-xylose isomerase. **Current Proteins Peptides Science**,. v.1, n3, p 237-254,2000.

PG27

Análise da interação da septina 9 humana com modelos miméticos de membrana

BROGNARA, G.[1]; ARAÚJO, A. P. U. de[1]

gabriel.brognara@usp.br

Septinas são proteínas que se ligam aos nucleotídeos de guanina, muitas sendo capazes de hidrolisá-lo, e estão envolvidas em diversas funções celulares nas quais se encontram associadas à membrana plasmática, como a citocinese, exocitose, fagocitose, tráfego de vesículas e etc. Essas proteínas já foram descritas em muitos organismos como leveduras, platelmintos, artrópodes e mamíferos, sendo conservadas em metazoários e fungos, embora estejam ausentes em plantas. A principal característica das septinas reside na sua polimerização, fato que promove a formação de complexos heteroligoméricos altamente organizados, que podem resultar em estruturas do tipo filamentos, anéis e redes. (1) Atualmente, o complexo de septinas humanas melhor caracterizado é um hexâmero formado pelas septinas humanas SEPT2, SEPT6 e SEPT7. (2) Entretanto, diversos estudos mostram que o complexo fisiológico pode possuir ainda a SEPT9 nas suas extremidades. Além disso, as septinas possuem a capacidade de interagir com fosfolipídeos específicos nas membranas, sendo a região polibásica (hélice-alfa0) indicada como responsável por essa interação. (3) Na verdade, além dos tipos de fosfolipídeos, outros fatores como a curvatura da membrana e o tipo do nucleotídeo associado parecem influenciar no processo de interação com a membrana. Deste modo, propomos nesse projeto estudos que possibilitem uma maior compreensão do mecanismo de associação das septinas às membranas. Particularmente, visa-se compreender o mecanismo de interação da SEPT9 com modelos miméticos de membrana, utilizando técnicas biofísicas variadas e buscando principalmente verificar a influência da região polibásica e o papel dos nucleotídeos nessa interação.). Na verdade, além dos tipos de fosfolipídeos, outros fatores como a curvatura da membrana e o tipo do nucleotídeo associado parecem influenciar no processo de interação com a membrana. Deste modo, propomos nesse projeto estudos que possibilitem uma maior compreensão do mecanismo de associação das septinas às membranas. Particularmente, visa-se compreender o mecanismo de interação da SEPT9 com modelos miméticos de membrana, utilizando técnicas biofísicas variadas e buscando principalmente verificar a influência da região polibásica e o papel dos nucleotídeos nessa interação.

Palavras-chave: Espectroscopia. Septinas. Interação com membranas.

Referências:

1 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 13, n. 3, p. 183-194, 2012.

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

3 AKIL, A. et al. Septin 9 induces lipid droplets growth by a phosphatidylinositol-5-phosphate

and microtubule-dependent mechanism hijacked by HCV. **Nature Communication**, v. 7, p. 12203-1-12203-19, 2016. doi: 10.1038/ncomms12203.

PG28

Análise e melhoria de um sistema de aquisição de pressão intracraniana não invasiva wireless

BRUNELLI, R.[1] ; ANDRADE, R. de A. P.[2]; MASCARENHAS, S.[1]

digon.brunelli@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

A Pressão intracraniana (PIC) é um dos parâmetros fisiológicos mais importantes para animais e humanos, sua morfologia é tão ou mais importante que seu valor absoluto (1), pois a variação da morfologia pode indicar possíveis patologias como Hidrocefalia, Edema Cerebral, entre outros. Este trabalho analisa e sugere melhorias em um Sistema de Aquisição de Pressão Intracraniana Não Invasiva Wireless (2), tornando-o mais eficiente, seguro, prático com a mobilidade e autonomia desejada. Os sistemas eletrônicos de aquisição dos sinais fisiológicos estão sendo embarcados em uma plataforma Intel Edison que será responsável pelo recebimento, tratamento, criptografia e envio dos sinais sem fio, para as plataformas de leitura e armazenamento dos dados. Um estudo de eficiência de recebimento e transmissão dos dados sincronizados será realizado desde a conversão analógica digital dos sinais, até a entrega dos pacotes wireless para as plataformas de leitura. O sistema é capaz de transmitir o sinal de até 24 canais com 24 bits de resolução a uma taxa de aquisição de 16kHz para cada canal, sem gerar aumento no atraso fim-a-fim. Para o monitoramento em humano, o sistema será vestível, possibilitando uma autonomia de 4 horas com o auxílio de uma bateria recarregável universal. O dispositivo terá um backup de até 160 horas de dados.

Palavras-chave: Pressão intracraniana. PIC. Medical instrumentation. Edison.

Referências:

1 CZOSNYKA, M. et al. Intracranial pressure: more than a number. **Neurosurgical Focus**, v. 22,n. 5, p. E10-1-E10-7, 2007.

2 ANDRADE, R. A. P. **Análise e melhoria de um sistema não invasivo de monitoramento da pressão intracraniana**. 2013. 151 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

PG29

Inativação fotodinâmica pela incorporação de curcumina induzida em microorganismos para melhorar a descontaminação microbiana

CAFACE, R. A.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]

raphael@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

As reações fotodinâmicas têm várias vantagens em relação às técnicas tradicionais, como seletividade e maior controle, uma vez que está usando a iluminação apropriada e a iluminação do tipo fotossensibilizante, permitirá uma maior aplicação e praticidade de sua utilização de maneira rápida, eficiente e barata para descontaminações microbiológicas. (1) Apesar disso, ainda existe a possibilidade de iluminar a amostra com baixa dose durante o período de incubação para causar danos prévios nas células, tal dano pode desregular o fluxo de fármaco e aumentar a absorção deste fotosensibilizador pelas células, mais tarde pode ser aplicado A dose total de luz para causar morte celular. O objetivo deste trabalho é desenvolver um novo protocolo para a aplicação da inativação fotodinâmica com o objetivo de aumentar a eficiência, bem como um estudo aprofundado das interações e monitoramento dinâmico do fotosensibilizador com células fúngicas (Candida Albicans). (2,3) As células de Candida Albicans interagiram com fotosensibilizadores (curcumina), que mostrou aumento da internalização por fotosensibilização por células através de uma pequena pré-iluminação durante o tempo de incubação, como observado nos ensaios de viabilidade de levedura e curcumina, demonstrou-se que as amostras que apresentaram pré-iluminação apresentaram diminuição de até seis ordens de grandeza nas unidades formadoras de colônias quando comparadas com as amostras tratadas pelo protocolo tradicional de inativação fotodinâmica. (3) Este trabalho visa otimizar este protocolo para células de levedura e ampliou sua aplicação para animais celulares, que serão estudados usando técnicas de microscopia confocal de fluorescência e imagens de vida de fluorescência. Foi possível compreender a interação entre fotossensibilizador e células, além de estudar a ligação deste fotossensibilizador em diferentes regiões da célula.

Palavras-chave: PDT. Descontaminação. Curcumina

Referências:

1 SILVA, A. P. **Inativação dos micro-organismos causadores da onicomicose por terapia fotodinâmica** - estudo in vitro e clínico. 2013. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013

2 ROMANO, R. A. **Aumento da eficiência da inativação fotodinâmica pela incorporação de fotossensibilizador induzida por luz em Candida Albicans**. 2016. 117 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

3 MENEZES, P. F. C. **Estudos espectroscópicos e citotóxicos do Photogem fotodegradado e dos fotoprodutos formados pela irradiação com laser**. 2006. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.

PG30

Investigation of PDT effects on 3D model of breast cancer

CAMPOS, C. de P.[1]; INADA, N. M.[1]; KURACHI, C.[1]

carolinapancampos@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Breast cancer is the main cause of death in women worldwide. The treatment approaches for this disease depend on the type and stage of the tumor but include mainly surgery, radiotherapy and chemotherapy. However, there is still no non-invasive and also effective treatment for this type of cancer in advanced stages. In the last few decades, photodynamic therapy (PDT) has been investigated in clinical studies as a non-invasive alternative for chest wall recurrences after surgery (1) and also with *in vitro* studies. To understand PDT effects in breast tumors, *in vitro* studies have been performed using three-dimensional (3D) models which mimic better the natural environment of the tumor compared to monolayer. (2) Among 3D culture models, the magnetic levitation model (MLM) allows the formation of spheroids of the order of millimeters in few days. (3) The purpose of this work is to investigate the effects of PDT in a MLM of MCF-7, a breast cancer cell line. The spheroid characterization will be performed by fluorescence microscopy of stained cryosectioning samples and by images of phase contrast microscopy. PDT will be performed using protoporphyrin IX (PpIX) as the photosensitizer (PS) which will be excited at 630 nm. To assess the PDT outcome, flow cytometry, MTT and live/dead staining will be used. Results of PS cytotoxicity showed that from 0.1 to 20 μg/mL, PpIX does not cause cell damage in the dark. Under confocal microscopy, it was possible to see an uneven PpIX distribution and low penetration on large spheroids at concentration of 0.9 μg/mL 20 hours after dark incubation. Higher PpIX concentrations and different incubation times are being tested and cryosectioning of the tumors analyzed by fluorescence microscopy will provide information about PpIX distribution inside the spheroids. All these methodologies are necessary to be defined and standardized to start the experiments of mortality and resistance after PDT protocols.

Palavras-chave: Photodynamic therapy. 3D culture. Magnetic levitation model.

Referências:

1 CUENCA, R. E. et al. Breast cancer with chest wall progression: treatment with photodynamic therapy. **Annals of Surgical Oncology**, v. 11, n. 3, p. 322-327, 2004

2 AGGARWAL, N. et al. Photodynamic therapy as an effective therapeutic approach in MAME models of inflammatory breast cancer. **Breast Cancer Research and Treatment**, v. 154, n. 2, p. 251-262, 2015.

3 SOUZA, G. R. et al. Three-dimensional tissue culture based on magnetic cell levitation. **Nature Nanotechnology**, v. 5, n. 4, p. 291-296, 2010.

PG31

Implementação de protocolos de imagens por ressonância magnética para estudos morfológicos de meios porosos

CARDOSO, C.[1]; FOERSTER, B. U.[1]; OLIVEIRA, E. L.[1]; FORTULAN, C. A.[2]; BONAGAMBA, T. J.[1]; PAIVA, F. F.[1]

camilabaleiro@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Escola de Engenharia de São Carlos - USP

As técnicas de Ressonância Magnética (RM) têm aplicações em áreas que vão desde ciência dos materiais até diagnóstico médico. Em específico, uma área de aplicação que vem crescendo é a de meios porosos, principalmente devido ao interesse da indústria petrolífera. Entretanto, até o presente momento, muito do que foi feito se baseia em medidas de relaxometria, o que impossibilita qualquer tipo de avaliação espacial dessas rochas. (1) Este trabalho tem como objetivo principal desenvolver, implementar e avaliar a aplicabilidade de métodos de imagens por RM para o estudo da morfologia de meios porosos. Esses sistemas apresentam tempos de relaxação bastante curtos e diferenças de susceptibilidade entre as paredes da rocha e os poros, o que compromete a qualidade dos dados obtidos a partir de RM. (2) Por essa razão, essa etapa do trabalho se concentrou em avaliar as imagens obtidas por RM no que se refere à morfologia, usando imagens obtidas por microtomografia como referência. Para esse estudo, foram preparadas 3 rochas sintéticas de alumina com um ligante (PVB) que confere a plastificação e resistência após a conformação. Nelas foram introduzidos poros de diferentes tamanhos (rocha 1: poros de 1,0 a 1,5mm de diâmetro e rocha 2: poros de 600μm a 1mm) e caminhos que representam "wormholes" (rocha 2 e rocha 3), que são os responsáveis pelo maior fluxo interno nas rochas. Isso foi feito utilizando grafite que, após o processo de sinterização, é eliminado do meio. Para realização das imagens por RM foi elaborado um protocolo utilizando uma sequência FLASH com resolução isotrópica de 260μm, TE=5ms, TR=40ms, largura de banda de 20kHz e ângulo de flip de 12^o. Foram realizadas 15 médias e a duração foi de 1h30. As imagens de microtomografia foram adquiridas com uma resolução de 16μm, utilizando um filtro de cobre, 4 médias e duração total de 1h40. O protocolo de processamento dessas imagens foi implementado de maneira a viabilizar a análise comparativa dos dados obtidos. Foram medidas as dimensões dos poros e "wormholes" para ambos os conjuntos de dados. Para as rochas 1 e 3, a diferença máxima de tamanho de poros e espessura dos "wormholes" foi de 200μm enquanto para a amostra que continha poros menores foi de 300μm. Esses valores máximos de desvio representam variação de 1 pixel tipicamente e podem estar sendo influenciados por efeitos de volume parcial. Os resultados revelam que apesar da variação na susceptibilidade do meio e dos baixos tempos de relaxação, o comprometimento na avaliação final está abaixo da resolução espacial da técnica e, portanto, não deve ser um limitante. Isso sugere que a técnica de imagens por RM pode contribuir para o estudo de meios porosos. Muito embora para o estudo de morfologia a microtomografia já ofereça bons resultados, imagens por RM deve viabilizar a investigação não invasiva de problemas nos quais a dinâmica de fluidos é relevante, o que ainda representa um desafio na área de estudos de meios porosos.

Palavras-chave: Meios porosos. Imagem por ressonância magnética.

Referências:

1 MITCHELL, J. et al. Magnetic resonance imaging in laboratory petrophysical core. **Physics Reports**, v. 526, n. 3, p. 165–225, 2013.

2 HAACKE, E. M. et al. **Magnetic resonance imaging**: physical principles and sequence design. New York : Wiley, 1999.

PG32

Discretização de erros na fixação do gauge de Landau na rede: uma generalização

CARVALHO, L. F.[1]; CUCCHIERI, A.[1]; MENDES, T. C. R.[1]

leo.fc.tavola@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Em Teoria Quântica de Campos na rede, muitas grandezas físicas dependem explicitamente do espaçamento de rede a. Por exemplo, o quadri-momento na rede, $\hat{p}_\mu$, se relaciona com o quadri-momento contínuo p_μ, pela relação: $\hat{p}_\mu = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{ap_\mu}{2}\right) = p_\mu - \frac{p_\mu^3}{4}a^2 + \cdots$. Os termos dependentes do parâmetro de rede são chamados de artefatos hipercúbicos, e existem diversas técnicas computacionais para eliminar, ou pelo menos reduzir, a influência desses artefatos nos cálculos de interesse. A Fixação de Gauge, em simulações numéricas de teorias não abelianas na rede, é crucial para o cálculo de grandezas que dependem da escolha de gauge, como o propagador de quarks e o propagador de glúons. Porém, como no caso do quadri-momento de rede, a fixação do gauge de Landau na rede só é igual ao caso contínuo, $\sum_\mu \partial_\mu A_\mu = 0$, na primeira ordem da expansão em termos do espaçamento de rede a. No trabalho (1) foi proposto um novo funcional (chamado pelos autores de $F_2\{U\}$), que combinado ao funcional padrão de fixação do gauge ($F_1\{U\}$), pode eliminar o primeiro termo hipercúbico. Mostramos nesse trabalho, que ao menos no nível teórico, é possível propor novos funcionais $F_3\{U\}$, $F_4\{U\}, \cdots$, cada novo funcional pode ser combinado aos anteriores para eliminar mais um termo hipercúbico da expansão. Em outras palavras, mostramos que é possível construir novos funcionais que eliminam sistematicamente os artefatos hipercúbicos.

Palavras-chave: Lattice. Landau gauge . Hypercubic artifacts.

Referências:

1 BONNET, F. D. R. et al.Discretization errors in Landau gauge on the lattice. **Australian Journal of Physics,** v.52,p.939-948, 1999.doi:10.1071/PH99047.

PG33

A universal platform for fabricating organic electrochemical devices

CAVASSIN, P.[1]; FARIA, G. C.[1]

priscila.cavassin@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A device that has been heavily investigated over the last few years is the Organic Electrochemical Transistor (OECT). In general, OECTs operate at relatively low voltages (< 1V) that are suitable for aqueous environments and biological tissues, and have been successfully used to monitor the integrity of barrier tissues, in-vitro glucose concentrations and in-vivo neural activities. (1) Despite recent advancements in device fabrications and materials developments, however, only a select few polymers have been found to stably operate as active channels in OECT devices. The majority (>99%) of traditional semiconducting polymers do not uptake water, are not electrochemically oxidized or reduced in water, and therefore cannot be used as the active channel. To this end, we have developed both device architectures and general material guidelines that allow for the fabrication of OECTs with semiconducting polymers that do not uptake water. By taking advantage of the solubility of semiconducting polymers in organic solvents and the water-immiscibility of such solvents, we successfully fabricated OECTs with high transconductance, ON/OFF ratios of up to 10^6 , and three-fold enhancements in stability. The device architecture and methods presented herein are expected to apply to all semiconducting polymers and enable, for the first time, thousands of water-insoluble materials that have been developed over the last several decades to be used for organic bioelectronics.

Palavras-chave: Organics electronics. Electrochemical devices.

Referências:

1 ZHANG, M. et al. Fabrication of organic electrochemical transistor arrays for biosensing. **Biochimica Biophysica Acta** : general subjects, v.1830, n.9, p.4402–4406,2013.

PG34

Peptídeo beta-amiloide da doença de Alzheimer e sua interação com peptídeos D-enantioméricos estudados por Ressonância Magnética Nuclear

CAVINI, Í. A.[1]; MUNTE, C. E.[1]; WILLBOLD, D.[2]; GARRATT, R. C.[1]; KALBITZER, H. R.[3]

italo.cavini@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Institute of Complex Systems - ICS

[3] Institute of Biophysics and Physical Chemistry - Universitat Regensburg

A doença de Alzheimer (DA) é uma das mais comuns e severas formas de demência. O peptídeo beta-amiloide (Abeta) é o componente majoritário das placas amiloides encontradas no cérebro de pacientes com DA e acredita-se que sua agregação seja a causa primária da doença. (1) Produto de clivagem da proteína precursora amiloide, o peptídeo Abeta apresenta em solução um intrincado equilíbrio entre estados monoméricos, oligoméricos e fibrilares. Acredita-se que um ou mais estados oligoméricos sejam responsáveis pela toxicidade de Abeta. A técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de alta pressão permite a detecção de estados conformacionais raros de mais alta energia, quase não populados a pressão ambiente. (2) O presente trabalho tem como objetivo caracterizar termodinamicamente e estruturalmente os confôrmeros monoméricos de Abeta e estudar sua interação com peptídeos D-enantioméricos inibidores de polimerização. Medidas de RMN do peptídeo Ab(1-40) monomérico em solução foram realizadas na Universidade de Regensburg, Alemanha utilizando espectrômetro Bruker de 800 MHz com criosonda acoplado a um sistema de aplicação de pressão hidrostática. Séries de espectros 1H-15N-HSQC, 1H-13C-HSQC e 2D-HNCO foram adquiridas em pressões de 3 a 200 MPa, com intervalo de 20 MPa e em duas temperaturas distintas (277 e 288 K). A dependência resíduo-a-resíduo dos deslocamentos químicos de RMN com a pressão indica ao menos três estados conformacionais monoméricos em equilíbrio. Considerando um modelo de troca rápida, o fitting global das curvas de deslocamento químico e volume dos picos forneceu os parâmetros termodinâmicos para as transições entre os confôrmeros considerados. A caracterização termodinâmica será complementada com a obtenção das estruturas tridimensionais de Abeta por RMN em pressões distintas. Espectros NOESY bidimensionais a pressão ambiente e a 200 MPa foram recentemente adquiridos e uma análise qualitativa mostra, nas diferentes pressões, conformações com diferentes graus de estruturação e conteúdo helicoidal. Adicionalmente, a interação de Abeta com peptídeos D-enantioméricos inibidores de polimerização foi investigada, utilizando-se os peptídeos denominados RD2 e RD2D3. Tais peptídeos de enantiomeria não usual podem ser ingeridos oralmente sem ser degradados por proteases e foi visto que podem interagir com oligômeros de Abeta, transformando-os em agregados não tóxicos. (3) Titulando-se separadamente os peptídeos a uma amostra monomérica de Abeta, a intensidade dos sinais de RMN é fortemente diminuída em ambos os casos, indicando a formação de complexos de alta massa. Ao final da titulação, foi detectada a presença de um confôrmero monomérico de Abeta que parece não sofrer agregação com a adição dos D-peptídeos. O estudo do papel dos confôrmeros monoméricos do peptídeo beta-amiloide

certamente contribuirá para o melhor entendimento das vias de agregação do peptídeo e suas estruturas potencialmente ajudarão no planejamento de moléculas que estabilizem uma ou mais conformações, prevenindo a formação amiloide.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Doença de Alzheimer. Peptídeo beta-amiloide.

Referências:

1 HARDY, J.; SELKOE, D. J. The amyloid hypothesis of Alzheimer's disease: progress and problems on the road to therapeutics. **Science**, v. 297, n. 5580, p. 353-356, 2002.

2 MUNTE, C. E. et al. Distinct conformational states of the Alzheimer β[U+2010]amyloid peptide can be detected by high[U+2010]pressure NMR spectroscopy. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 52, n. 34, p. 8943-8947, 2013.

3 FUNKE, S. A. et al. Oral treatment with the D-enantiomeric peptide D3 improves the pathology and behavior of Alzheimer's disease transgenic mice. **ACS Chemical Neuroscience**, v. 1, n. 9, p. 639-648, 2010.

PG35

Simulações ambientais e caracterização espectroscópica in situ de potenciais bioassinaturas moleculares para aplicação em missões espaciais

CERINI, M. F.[1,2]; GALANTE, D.[2]; RODRIGUES, F.[3]

mfcerini@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

[3] Instituto de Química - USP

A radiação estelar, principalmente na faixa do ultravioleta extremo e de vácuo ($\lambda < 200nm$), é um fator muito importante na evolução de moléculas orgânicas em ambientes espaciais: é a principal fonte de energia para a ocorrência de reações químicas e, em excesso, é um dos principais fatores responsáveis pela degradação das moléculas, e consequente destruição de bioassinaturas. Portanto, a correta compreensão de seu papel fotoquímico nos processos de formação, transformação e destruição nos fornece importantes informações sobre a estabilidade de compostos orgânicos complexos em ambientes espaciais e/ou planetários. Levando em conta o constante intercâmbio de material orgânico entre tais meios, essas informações podem nos ajudar na compreensão da origem e evolução da vida na Terra, e possivelmente em outros lugares do Universo. Além disso, esses dados podem contribuir para missões espaciais, dando suporte ao desenvolvimento e otimização de técnicas e procedimentos, tanto para testar os efeitos da exposição de biomoléculas a ambientes espaciais reais – a bordo de plataformas como CubeSats, com técnicas de medida *in situ* (1) –, quanto para a detecção de bioassinaturas em superfícies planetárias extraterrestres. O feixe policromático de radiação síncrotron na linha de luz TGM (*Toroidal Grating Monochromator*), otimizada para trabalhar na região do ultravioleta e ultravioleta de vácuo (UV e VUV), foi utilizado para irradiar amostras de biomoléculas sob alto vácuo ($\sim 10^{-7}$ - 10^{-6} mbar), simulando algumas das condições de um ambiente espacial (superfície planetária sem atmosfera). Além disso, uma câmara de simulação multiparamétrica foi utilizada para simular as condições de um ambiente de superfície em Marte, variando a pressão, composição gasosa, temperatura e a radiação solar (usando uma lâmpada de Xe de 1000 W, filtro de água e filtro AM0). As amostras expostas foram principalmente pigmentos biológicos, como o β-caroteno e a Clorofila a, ambos puros e misturados com diferentes substratos inorgânicos para mimetizar superfícies de planetas rochosos, satélites e asteroides. Os substratos incluem as argilas caulinita e montmorilonita, e os simulantes do regolito Lunar e Marciano, JSC-1A e JSC Mars-1A, respectivamente. As mudanças físicas e químicas nas amostras expostas foram medidas por reflectância no UV-vis *in-situ* e em função do tempo, e por espectroscopia de espalhamento Raman *ex-situ*. Ambas tem provado serem técnicas excelentes para missões espaciais por serem de não-contato, minimamente destrutivas e não requerem nenhum preparo de amostras.

Palavras-chave: Bioassinaturas espectroscópicas. Simulação ambiental. Missões Espaciais.

Referências:

1 COTTIN, H. et al. Space as a tool for astrobiology: review and recommendations for experimentations in earth orbit and beyond. **Space Science Reviews**, v. 209, n. 1-4, p. 83-181, 2017.

PG36

A descarga elétrica de um gimnotiforme pulsador: mapeamento espaço temporal de um "chirp"

CESARINO, V.[1]; PINTO, R. D.[1]

vinicius.cesarino@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O núcleo marcapasso do *Gymnotus carapo* é capaz de gerar um grande repertório comportamental, aferido pelo campo elétrico gerado pelas células elétricas (Eletrócitos) presentes ao longo de toda extensão do peixe, sendo estes comportamentos caracterizados por: aceleração na frequência de disparos (Novelty response); interrupções na sequência de disparos (Off); e um comportamento cuja natureza ainda se é debatida pela comunidade, o Chirp, alterando drasticamente a forma e frequência dos pulsos elétricos emitidos pelo organismo. Sendo este último comportamento o objeto de estudo. (1) O mapeamento e modelagem da propagação espaço-temporal de um padrão estereotipado específico do órgão elétrico (Chirp) ao longo da lateral de um gimnotiforme (*Gymnotus carapo*) pode nos auxiliar a compreender os mecanismos de coordenação dos padrões efetores do órgão elétrico do peixe. O mecanismo de propagação e um modelo proposto para a geração e propagação dos pulsos elétricos ao longo dos eletrócitos é conhecido pela literatura. (1) Entretanto observar um padrão do tipo Chirp tem se mostrou um desafio. Como este comportamento elétrico é estritamente social (2), é necessário que o organismo esteja envolvido em um contexto de disputa para que o fenômeno seja observado. Além deste desafio comportamental, é necessário que o peixe elétrico esteja imobilizado em um material maleável e de fácil manuseio que não interfira e nem deforme a geração de pulsos elétricos. Para tanto estabeleci, neste primeiro semestre, um protocolo para captura do comportamento elétrico desejado (Chirp), mantendo um peixe preso dentro de um tecido fino e tubular fixado nas extremidades do aquário e um peixe solto pelo aquário de modo a simular uma disputa por território. Tal protocolo permite que o fenômeno elétrico desejado seja capturado mantendo as especificações desejadas com simples procedimento para distinguir os sinais dos 2 peixes. Para adquirir o sinal elétrico emitido pelo peixe é necessário utilizar uma eletrônica específica, composta por um Headstage amplificador, capaz de desprezar ruído de modo comum. Neste semestre, foi possível, construir tais amplificadores, constituídos por um amplificador de Instrumentação de entrada do tipo FET de alta velocidade (INA111) capaz de cumprir a função desejada além de acrescentar um ganho ao sinal. Com o protocolo e a eletrônica estabelecidos, podemos executar experimentos diversos que investigam de perto o padrão de disparos específico (chirp), em especial o proposto para este projeto. Onze eletrodos estarão dispostos ao longo de todo comprimento do peixe de modo se ter uma aquisição do sinal elétrico com parâmetros espaciais e temporais durante Chirp. Com este resultado será possível investigar se o modelo proposto pela literatura é compatível, enfim, com qualquer natureza de comportamento elétrico que o peixe possa emitir ou ajustar um novo modelo para que esta lacuna seja preenchida.

Palavras-chave: Eletrocomunicação. Detecção de Chirp. Disputa de dominância. Gymnotus. Peixe elétrico pulsador.

Referências:

1 CAPUTI, A.; BUDELLI, R. The electric image in weakly electric fish: I. A data-based model of waveform generation in Gymnotus carapo. **Journal of Computational Neuroscience,** v.2, n.2,p.131-47, 1995. doi:10.1007/BF00961884.

2 GUARIENTO, R. et al. Automated pulse discrimination of two freely-swimming weakly electric fish and analysis of their electrical behavior during dominance contest, **Journal of Physiology-Paris**, v.110, n. 3, p.216-223, 2016.

PG37

Klein tunneling in heterstructures of Weyl semimetals

COSTA, J. V. I.[1]; CÂNDIDO, D. R.[1]; EGUES, J. C.[1]

joao.ignacio.costa@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The Klein tunneling (1) phenomenon is one of the most counterintuitive results of relativistic quantum mechanics. It is related to the full penetration Dirac particles through high barriers. Here we investigate the associated transmission probability of a single 3D Weyl cone in the context of condensed matter physics, where the effect can be observed easier due the zero effective electronic mass. (2) By applying the appropriated boundary condition between two 3D regions, differing by a barrier potential, we determine the transmission probability. We plot the transmission probability as a function of the electron's incidence angles, noting the formation of transmission rings. These rings are angles of electronic incidence that fully transmit the particles, and which radii depend on the height of the barrier potential V_0. We also propose as a further step the calculation of transmission functions in similar and more complex systems. (3) This work was supported by Capes and CNPq.

Palavras-chave: Klein tunneling. Weyl semimetals. Topological semimetals.

Referências:

1 Klein, O. Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von Dirac. **Zeitschrift für Physik**, v. 53, n. 3-4, p. 157, 1929.

2 KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. **Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene**. 2006. Available from: <https://arxiv.org/pdf/cond-mat/0604323.pdf>. Accessible at: 30 jun. 2017.

3 OKUGAWA, R.; MURAKAMI, S. Dispersion of Fermi arcs in Weyl semimetals and their evolutions to Dirac cones. **Physical Review B**, v. 89, n. 23, p. 235315, 2014.

PG38

Investigation of photophysical properties on Pt-complexes porphyrins

COCCA, L. H. Z.[1]; GOTARDO, F.[1]; DE BONI, L.[1]; IGLESIAS, B. A[2].; DIAS, R.[2]

leandro.cocca@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Química - UFSM

Photophysical properties of organic molecules have been studied since laser was invented. Additionally, molecular engineering made possible to build new materials which could overcome the nonlinear optical efects already studied on the primordium of the nonlinear optical spectroscopy. Different photophysical and photochemical characteristics have been changed on organic materials making it useful for several applications, such as optical limiters, saturable absorbers, two- and three-photon fuorescent dyes and so on. On the organic materials, a specific class known as porphyrins and phtalocyanines were extensively studied due to the high nonlinear optical effects. (1) Besides, the high intersystem crossing rate of this type of molecules has increase the attention on these materials due to the application in phototherapy dynamics to kill cancer (PDT) and bacteria, solar cells manufacturing and in optical limiters. Porphyrins are pi-conjugated organic molecules and because of this a high nonlinear absorption in UV-Vis region is observed. These molecules present both reverse saturable absorption (RSA) and saturable absorption (SA) according to wavelength of excitation. Also, porphyrins can be cited as materials that can have its photophysical properties modified according to peripheral structures or by the insertion of different metal ions inside macrocycle. In the present work, a full characterization of the photophysical parameters of three porphyrins molecules with the same main macrocycle structure but containing a Pt-complex in different positions of the peripheral structures was studied. This characterization was performed by employing different nonlinear optical techniques in different temporal scale. The excited singlet and triplet state absorption cross section were determined by using Z-Scan technique at different wavelengths. (2) Also, intersystem crossing rate was measured with Pulse Train Z-Scan technique. The photophysical properties of these porphyrins show that excited singlet and triplet absorption cross sections are higher than the ground estate ones at distinct wavelenghts, which results in the RSA mechanism. Additionally, SA efect was observed for the Q-band region, demonstrating that at the excited state, these porphyrins are complete transparent at the Q-band. These results show that this type of porphyrins can be used for optical limiters manufacturing and saturable absorbers for a chosen wavelength. Triplet state formation was evaluate to be considerable high, which is interesting characteristic to be used in photosensitizers for PDT.

Palavras-chave: Porphyrins. Phtalocyanines. Z-Scan.

Referências:

1 COCCA, L. H. et al. Mechanism of the Zn(II)phthalocyanines' photochemical reactions depending

on the number of substituents and geometry. **Molecules**, v. 21, n. 5, p. 635, 2016. doi: 10.3390/molecules21050635.

2 SHEIK-BAHAE, M. et al. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, 760-769, 1990. doi: 10.1109/3.53394.

PG39

Influência da espécie iônica na característica elétrica de semicondutores mistos orgânicos

COLUCCI, R.[1]; FARIA, G. C.[1]

rcolucci@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos grandes diferencias dos materiais semicondutores orgânicos é sua habilidade de suportar transporte eletrônico e iônico. Tal habilidade possibilita esses condutores mistos obterem sucesso ao serem aplicados como dispositivos que realizam interface com sistemas biológicos. (1) Um exemplo é o transistor orgânico eletroquímico (OECT), esse dispositivo é formado por dois contatos de ouro (fonte e dreno) que são conectados por um filme fino de material semicondutor orgânico (canal). Sobre o canal é colocado um eletrólito no qual está imerso um eletrodo de referencia (porta). Quando uma diferencia de potencial é aplicada entre a porta e a fonte íons migram para o interior do canal dopando ou desdopando o mesmo. Essa mudança no grau de dopagem é monitorada aplicando uma diferença de potencial entre o dreno e a fonte. Como os processos biológicos ocorrem através do fluxos de inúmeros íons distintos, um ponto chave para se aprimorar estes dispositivos é compreender como as propriedades de tais materiais se comportam na presença de diferentes íons. Para tal estudo, foram confeccionados OECTs com poli(3,4-etileno dioxitiofeno):poliestireno sulfonado (PEDOT:PSS) como camada ativa. A resposta elétrica desses dispositivos foram caracterizadas utilizando diversos eletrólitos aquosos, com concentração de 10 a 50 mM, a saber: NH_4Cl, KCl, NaCl, $CaCl_2$ e $MgCl_2$. Os resultados demonstram que a corrente inicial (Vg = 0 V) varia quando o canal entra em contato com cada um dos diferentes eletrólitos, indicando que íons distintos interagem de maneira diferente com o canal. Tal variação obedece a famosa série de Franz Hofmeister, que classifica os íons de acordo com sua capacidade de aumentar ou diminuir a solubilidade de proteínas. (2) Observamos também, que a transcondutância e, portanto, a capacitância sofrem variações quando o transistor é operado com cada um dos eletrólitos utilizados. No entanto, essa variação não segue a série de Hofmeister, e está provavelmente relacionada à difusão dos íons assistida por campo elétrico pela cadeia polimérica.

Palavras-chave: Condutores Mistos. Eletrólito. Transcondutância.

Referências:

1 STAVRINIDOU, E. et al. Direct measurement of ion mobility in a conducting polymer. **Advanced Materials,** v. 25, n. 32, p. 4488-4493, 2013.

2 KUNZ, W.; HENLE, J.; NINHAM, B. W. 'Zur Lehre von der Wirkung der Salze'(about the science of the effect of salts): Franz Hofmeister's historical papers. **Current Opinion in Colloid and Interface Science**, v. 9, n. 1-2, p. 19-37, 2004.

PG40

Black holes in scalar-tensor theory

CONSOLE, F.[1]; HARTMANN, B.[1]

felipe.console@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

General Relativity (GR) is the best tested gravity theory that we have up to date. However, different unsolved questions such as space-time singularities at the center of black holes and at the Big Bang as well as need to explain what dark matter and dark energy are, respectively, leads to the questions how models can be formulated that go beyond GR. One possibility is to add a scalar field to the theory, such that gravity is described by a scalar-tensor model. (1) In recent years, so-called Galilean scalar-tensor models have gained popularity. (2) In these models the scalar field is directly coupled to term that contains curvature terms in second order and possesses a shift symmetry which leads to a conserved current in the model. We are investigating black hole solutions in this model, in particular, we are interested in the construction of solutions that are asymptotically Anti-de Sitter.

Palavras-chave: Black holes. Scalar-tensor theory.

Referências:

1 SOTIRIOU, T.P.; ZHOU,, S.Y. Black hole hair in generalized scalar–tensor gravity: an explicit example. **Physical Review D**, v. 90, p.124063, 2014.doi:10.1103/PhysRevD.90.124063

2 BABICHEV,C.;. CHARMOUSIS, C.; LEHEBEL, A. Black holes and stars in Horndeski theory. **Classical Quantum Gravity,** v. 33, n. p. 54002, 2016.doi:10.1088/0264-9381/33/15/154002

PG41

Biosensors based on immobilized folic acid molecules for cancer cells detection

CORREIA, A. R.[1]; VIEIRA, N. C. S.[2] ; ZUCOLOTTO, V.superscript1

abilenesax@yahoo.com.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] UNIFESP - São José do Campos

Recently, folate receptors (FRs) have been used as a strategic target in the detection of cancer cells. (1) FRs are folate binding proteins with a high affinity for folic acid (FA) K_d = 0.1–10 nM). (2) This project is aimed at developing biosensors for the detection of human cervical cancer cells (HeLa) based on electrochemical methods platforms modified with folic acid. (3) The biorecognition layer of the biosensors was modified with layer-by-layer (LBL) films of poly(allylamine hydrochloride) (PAH) and folic acid (FA). The films had been characterized using UV-Vis absorbance, FTIR (Fourier-Transform Infrared Spectroscopy), AFM (Atomic Force Microscopes). Electrochemical analysis including (Cyclic Voltammetry) CV and (Electrochemical Impedance Spectroscopy) EIS measurements were performed via a three electrodes configuration using a platinum foil, Ag/AgCl and (Indium Tin Oxide) ITO plates as counter, reference and work electrode, respectively. The redox probe used as supporting electrolyte was 1mM Ferrocyanide/ Ferricyanide redox couple in PBS solution (pH 7.4). The ITO/PAH/FA electrode will be immobilized with FRs to test cancer cell false positive. We expected the charge transfer resistance increased in the presence of the FRs, suggesting that FRs will be captured onto the sensor interface.

Palavras-chave: Folate receptors. Biosensors, Folic acid

Referências:

1 COSTA, C., et al. Biosensors for the detection of circulating tumour cells. **Sensors**, v.14, n.3, p. 4856-4875, 2014.

2 CHEN, C., et al. Structural basis for molecular recognition of folic acid by folate receptors. **Nature**, v.500, n.7463, p.486-489, 2013.

3 LIU, J. et al. Highly sensitive and selective detection of cancer cell with a label-free electrochemical cytosensor. **Biosensors and Biolectronics**, v.41, p.36-441,2013.doi: 10.1016/j.bios.2012.09.002.

PG42

Biossurfactantes produzidos por linhagens bacterianas isoladas de reservatório de petróleo: produção e avaliação das propriedades tensoativas.

COSTA, G. C.[1]; BOSSOLAN, N. R. S.[1]

gabrielle_cc@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes (BS) são moléculas de caráter anfipático produzidas por microrganismos, com potencial de aplicação em vários setores industriais e ambientais, pois são biodegradáveis, apresentam baixa toxicidade e muitas têm atividade em extremos de temperatura, pH e salinidade. Estudos de produção de BS a partir de substratos renováveis de baixo custo têm sido feitos, de modo a tornar atrativa sua produção comercial em larga escala. Na indústria petrolífera, esse tipo de molécula pode ser utilizado em processos de recuperação terciária do petróleo (MEOR). (1) O tipo, a qualidade e a quantidade de BS produzido são influenciados tanto pela fonte de carbono quanto pelas concentrações de nitrogênio, fósforo, manganês e ferro no meio de cultura, além das condições de cultivo (pH, temperatura, salinidade e agitação). (2) O presente projeto busca otimizar as condições de máxima produção de BS por duas linhagens bacterianas, Ar70C2 e AR35B3, isoladas de rocha de um reservatório *offshore* localizado no sudeste do Brasil, com vistas à aplicação em MEOR. Neste resumo serão apresentados alguns resultados alcançados nos ensaios com a linhagem Ar70C2. Esta bactéria é um bastonete formador de esporos, halofílico e cuja temperatura ótima de crescimento é 55°C. Os cultivos foram feitos em meio de cultura definido (Meio Mineral) de composição (g/L): $NaNO_3$(1,00), Na_2HPO_4 (2,20), $MgSO_4.7.H_2O$(0,60), NaCl (35,0), KH_2PO_4 (1,40), $CaCl_2$ (0,02) e $FeSO_4.7H_2O$ (0,001). As fontes de carbono testadas foram glicose, melaço, soro de leite de búfala e óleo de soja usado. Os cultivos foram incubados a 55°C, em agitação de 100 rpm e estático, e na presença e ausência de extrato de levedura. O crescimento bacteriano foi medido por densidade óptica (DO) e a produção de BS, pelo índice de emulsificação E_{24}. As fontes de carbono que resultaram em melhor desempenho foram glicose e melaço, em condição estática e sem extrato de levedura: com glicose, registrou-se uma DO máxima de 1,96 em 170 horas de cultivo e um E_{24} médio de 61% em 146h de cultivo; com melaço, uma DO máxima de 2,0 em 170 horas de cultivo e um E_{24} médio de 60% em 98 horas de cultivo. Com o soro de leite de búfala e óleo de soja usado, nas mesmas condições, as DO máximas e E_{24} médios foram, respectivamente: 1,05 e 38% (ambos em 146 horas de cultivo), e 0,25 (50 horas de cultivo) e 58% (74 horas de cultivo). Os ensaios realizados mostraram que o isolado Ar70C2 cresceu e produziu BS em condições de altas temperatura e salinidade, fator importante a ser considerado para o uso de microrganismos em processos de recuperação terciária de petróleo, e utilizando uma fonte de carbono de baixo custo, fator que pode baratear o processo de produção do BS. As próximas etapas do trabalho prevêem: ensaios de produção do BS pelas duas linhagens, variando-se a fonte de carbono (C), a fonte de nitrogênio (N) e a relação C/N; testes de estabilidade do BS produzido pelas duas linhagens, frente a alterações de temperatura, salinidade e pH.

Palavras-chave: Biossurfactante. Petróleo. Bacillus. Melaço. MEOR.

Referências:

1 PEREIRA, J. F. B. et al. Optimization and characterization of biosurfactant production by Bacillus subtilis isolates towards microbial enhanced oil recovery applications, **Fuel**, v. 111, p. 259-268, 2013.doi:10.1016/j.fuel.2013.04.040

2 SAHARAN, B. S.; SAHU, R, K.; SHARMA, D. A review on biosurfactants: fermentation, current developments and perspectives. **Genetic Engineering and Biotechnology Journal**, v. 2011, p. 1-14, 2012.

PG43

Livertool: an open-source tool for liver fat fraction estimation with magnetic resonance images

COSTA, Y. A. da[1]; FLORES, G. A.[2]; RODRIGUES, E. L. L.[1]; PAIVA, F. F.[2]

yuri.ajala@gmail.com

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

The presence of fat in liver tissue, also known as hepatic steatosis, is a pathogenic abnormality, found in up to 30% of the US population. Amongst noninvasive approaches for quantification of hepatic steatosis, magnetic resonance imaging (MRI) has shown great relation to biopsy, current gold standard. Hepatic steatosis quantification in MRI is accomplished in terms of liver fat fraction (FF) estimation and its methods rely on voxel signal behavior in so-called in-phase and opposed-phase (IP/OP) images. In this context, FF represents the relation of fat to water proton density in a studied volume. Despite the methods being available in scientific community, researchers and test centers willing to adhere to this imaging quantification method have to either perform calculations on their own or use proprietary software developed by their MR scanner manufacturer, when available. A graphical tool was designed and implemented in MATLAB R2015a 64-bit (Mathworks, Natick, USA). Two stable approaches were used for FF estimation, according to the number of echoes available per slice: classical dual-echo as proposed by Dixon (1), which requires two echoes, and multi-interference (2), for three or more echoes. Main tool features include: separate slice and echo navigation bar especially useful for IP/OP images; ROI drawing tool in various shapes; a plot of signal intensity over echo times for the ROIs, and tables containing copyable results. Next update will be implemented in Python language in order to make it a free, open source alternative to other current scanner-dependent software. It currently provides classical and cutting-edge FF estimation methods but still requires improvements in order to guarantee stability and ease of use for untrained users.

Palavras-chave: Fat fraction.Liver steatosis. MRI.

Referências:

1 DIXON, W. T. Simple proton spectroscopic imaging. **Radiology**, v. 153, n. 1, p. 189–194, 1984.

2 YOKOO, T. et al. Nonalcoholic fatty liver disease: diagnostic and fat-grading accuracy of low-flip-angle multiecho gradient-recalled-echo MR imaging at 1.5 T. **Radiology**, v. 251, n.1, p.67–76, 2009.

PG44

Caracterização de hematita - Serra do Espinhaço (Minas Gerais).

CRUZ, C. G. C.[1]; ANDRADE, M. B. de[1]

cairocrz@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Abordamos aqui nesse projeto, a caracterização da espécie mineral hematita proveniente da Serra do Espinhaço - Minas Gerais, que se mostra economicamente importante, se tratando de uma região que se estende desde o quadrilátero ferrífero até a Bahia. A região de extração mineral da Bahia apresenta um minério de ferro com um teor >50%. (1) Seguintes técnicas foram utilizadas e se mostraram totalmente eficazes em suas analises: espectroscopia Raman, microscópio Eletrônico de Varredura (MEV) acoplado a um espectrômetro de energia dispersiva (EDS) e difração de raios X (DRX). O difratograma de pó da amostra apresentou reflexões padrões de hematita e algumas que poderiam ser relacionadas com a magnetita. A analise dos resultados da coleta, foram feitos de acordo com a *Inorganic Crystal Structure Database (ICSD).* O espectro Raman apresentou bandas referentes à hematita em: 220 cm^{-1}, 238 cm^{-1}, 290 cm^{-1}, 403 cm^{-1}, 494 cm^{-1}, 604 cm^{-1}, 1306 cm^{-1}. Além de uma banda em 660 cm^{-1} que pode ser característica de magnetita, em contrapartida, existem algumas hematitas que apresentam essa mesma banda sem a presença de magnetita, sendo uma banda proveniente dos efeitos naturais ocorridos durante sua formação. Para a determinação de alguma possível fase de magnetita na amostra, foi utilizada a difração de raios X por meio de monocristal, Resultando: grupo espacial: R-3c, parâmetros de cela a= 5.0365(1)Å, b= 5.0365(1)Å, c= 13.762(3)Å, ângulos α= 90°, β=90°,γ=120°(2), dados que comprovam a presença de hematita sem a existência de uma fase de magnetita. O sinal dos elétrons retroespalhados providos pelo MEV, foi fundamental para a visualização de uma segunda fase de goethita em quantidade insignificante para ser vista no Raman. Como técnica final, o EDS para a analise qualitativa da composição da hematita, mostrando majoritariamente, Fe (ferro) e O (oxigênio), seguido de uma pequena proporção de Ti (titânio).

Palavras-chave: Caracterização. Hematite. Minério de ferro. Bahia. Serra do Espinhaço.

Referências:

1 QURESMA, L. F. **Balanço mineral brasileiro:** ferro. 2001. Disponível em: <http://www.dnpm.gov.br/dnpm/paginas/balanco-mineral/arquivos/balanco-mineral-brasileiro-2001-ferro>. Acesso em: 29 ago.2017.

2 ANTHONY, J. W. et al.(Ed.) **Handbook of mineralogy.** Mineralogical Society of America,2003. Disponível em: <http://rruff.info/doclib/hom/hematite.pdf>. Acesso em: 29 ago 2017.

PG45

Study of the long term in-field degradation of Polydimethylsiloxane (PDMS) based high-voltage insulators via low-field nuclear magnetic resonance

CUBGA, G.[1]; DEAZEVEDO, E. R.[1]; MURANO, M.[2]; MURANO A.[3]; AKCELRUD, L.[3]; MOLINARI, J.[4]

giovanni.p@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Institutos Lactec

[3] Universidade Federal do Paraná -UFPR

[4] Companhia Paranaense de Energia - Copel

Silicon based rubbers, in particular Polydimethylsiloxane (PDMS), are widespread employed as insulators in high-voltage transmission lines worldwide. PDMS, however, degrades over time in the presence of oxygen and/or ionizing radiation, losing the mechanical and dielectric properties suitable for such application. Although not fully understood, it is believed that the polymer degrades due to the formation of random crosslink points, since such mechanical constraints turn the polymer chains immobile, which accounts for the loss in elasticity and facilitate the percolation of charge carriers. (1) Recently time-domain nuclear magnetic resonance (TD-NMR) techniques were developed to probe the crosslink distribution in polymeric networks above the glass transition temperature. (2) With this in mind we employed TD-NMR in order to shed light into the degradation mechanisms of PDMS, the technique employed in the present work, based on the evolution of Double-Quantum NMR coherences, probes the dipolar coupling strength between hydrogen nuclei close to crosslink sites. In fact, the double-quantum signal is sensitive not only to the average coupling, but to the distribution of dipolar couplings. Since the magnitude of the coupling is proportional to the inverse of the internuclear distance a coupling distribution translates directly to a inter crosslink distance distribution and to a crosslink density. We studied a PDMS sample that was employed as an insulator and subject to ambient field conditions (solar radiation, rain water, etc) for over 20 years, the sample was provided by Copel. Micrometer thick slices of the sample were obtained in order to probe the crosslink density as a function of the proximity to the degradation source. Our preliminary results show that the proximity to both the atmosphere (UV-radiation/Oxygen) and to the electric field provided by the transmission line increase the rigid fraction of PDMS by about 10% as was seen by a small but noticeable change in the NMR signal. The DQ-NMR signal show that the average dipolar coupling and thus the average distance between crosslinks remains constant for all slices. The width of the distribution, however, increases with the proximity to degradation sources, this is indeed consistent with the formation of crosslinks throughout the sample.

Palavras-chave: PDMS degradation. Double-quantum NMR. Crosslink density.

Referências:

1 MELÉNDEZ-ZAMUDIO, M. et al. Study of a polydimethylsiloxane (PDMS) elastomer generated by gamma irradiation: correlation between properties (thermal and mechanical) and structure (crosslink density value). **Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials**, v. 27, n. 3, p. 622-632, 2017.

2 SAALWÄCHTER, K. Proton multiple-quantum NMR for the study of chain dynamics and structural constraints in polymeric soft materials. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 51, n. 1, p. 1-35, 2007.

PG46

Desenvolvimento de um microscópio óptico holográfico sem lentes

D'ALMEIDA, C. de P.[1]; MORIYAMA, L. T.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]

camila.paula.almeida@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A holografia surgiu em 1948, quando foi descoberta por Dennis Gabor como uma alternativa para melhorar a resolução de um microscópio eletrônico. A partir disso, essa técnica começou a ser usada em outros contextos por gravar a informação de amplitude e fase de um campo eletromagnético, com informações do objeto estudado, em uma imagem de interferência. Essa interferência acontece entre ondas provenientes de dois feixes: o feixe de referência e outro que interage (é transmitido ou refletido) pelo objeto. Com o desenvolvimento de sensores digitais de imagens surgiu também a holografia digital, possibilitando um processamento computacional dos hologramas. (1) Nesse trabalho, estamos desenvolvendo um microscópio holográfico digital que não utiliza lentes. Na configuração usada nesse sistema a luz proveniente de um LED (com emissão centrada em 455 nm) passa por um *pinhole* (150 m) e, após percorrer uma distância de aproximadamente 7 cm, incide sobre a amostra, posicionada sobre uma lâmina de vidro. A menos de 1 mm depois da lâmina se encontra um sensor digital (CCD, Thorlabs, EUA), usado para gravar o holograma da amostra. Essa imagem é, então, capturada e processada por um computador, afim de se obter a imagem reconstruída da amostra. Imediatamente após passar pela amostra, podemos considerar que o campo elétrico da luz é composto por uma componente que foi difratada pela amostra (objeto) e outra que passou direto por ela (referência). O sensor digital grava, então, a interferência dessas duas componentes da luz, que formam, por definição, um holograma. (2) A amostra é posicionada bem próximo do sensor da câmera, de modo que a distância amostra-sensor seja muito menor que a distância fonte-amostra, para que a imagem observada tenha magnitude igual a uma unidade, o que possibilita que o campo de visão do sistema seja equivalente ao tamanho do sensor. (3) Para se fazer o ajuste focal é necessário considerar a propagação do campo elétrico da luz correspondente à imagem do holograma. Essa propagação é feita utilizando o método do espectro angular, o qual considera a decomposição em frequência para cada pixel da imagem gravada. O objetivo desse trabalho é obter um microscópio com resolução equivalente aos microscópios tradicionais de luz branca e com a vantagem de ser compacto, de baixo custo e com maior campo de visão quando comparado aos microscópios ópticos tradicionais e possuir ainda facilidade de se fazer o ajuste focal digitalmente.

Palavras-chave: Holografia digital. Microscópio sem lentes.

Referências:

1 ROSSI, V.M. **Digital holographic microscopes**[U+202F]: design ,characterization , and Image reconstruction. [s.l.] SPIE Spotlight, 2017. v.SL29.

2 McLEOD, A., OZCAN,A. Unconventional methods of imaging: computational microscopy

and compact implementations, **Reports Progress of Physics**, v. 79, p.76001, 2016.. doi:10.1088/0034-4885/79/7/076001.

3 MUDANYALLI, O. et al. Compact , light-weight and cost-effective microscope based on lensless incoherent holography for telemedicine applications. **Lab on a Chip**.v.10, n.11, p.1417–1428, 2010. doi:10.1039/c000453g.

PG47

Electron paramagnetic resonance study of vanadium-doped antimony-germanate glasses

DANCIÃES, I.[1], DONOSO, J. P.[1], MAGON, C. J.[1], MONTESSO, M.[2], MANZANI, D.[2], NALIN, M.[2]

i.danciaes@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química - UNESP

Tetravalent vanadium ions has been used as an electron paramagnetic resonance (EPR) probe in solid state systems since its spectrum has characteristic lines and can be observed until room temperature. (1) In glasses, this ion almost exclusively appears in the vanadyl form, $(VO)^{2+}$. (2) In this work, we studied the local environment of vanadyl ions in $SbPO_4$4 – $GeO_2$2 glasses doped with 0.1mol% of V_2 O_5 with different thermal treatments times using EPR techniques, which are powerful tools to this study because it provides local information on the site symmetry, the coordination geometry, and the valence state of paramagnetic centers. X- and Q-band continuous wave EPR spectra shows the typical axial spectra with eightfold hyperfine structure. Spin Hamiltonian parameters were found by numerical simulation of these spectra with the Easy-Spin package for MatLab. (3) The results show two vanadyl sites in the glasses treated at 470 °C and 500 °C, one being the only site present in the spectra of the non-treated glass and the glass treated at 440 °C. The other site, created by the heat treatment, is more distorted. X- and Q-band Hyperfine Sublevel Correlation (HYSCORE) experiments were performed in the sample treated at 500 °C and the spectra shows a distribution of hyperfine couplings between the vanadyl ion and ^{31}P nuclei. Numerical simulations were performed to obtain the hyperfine parameters a_{iso} and T_{ii} and the spin population in the P 3s orbital and the distance between the vanadyl ion and the most far away ^{31}P nucleus were calculated at 0.17% and 0.47 nm, respectively. Financial support from CeRTEV, Center for Research, Technology and Education in Vitreous Materials (FAPESP 2013/07793-6) and CAPES are acknowledge.

Palavras-chave: EPR. Antimony-germanate glasses. HYSCORE.

Referências:

1 MAGON, C. J. et. al. Deconvolution of the EPR spectra of vanadium oxide nanotubes. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 222, p. 26-33, Sept. 2012. doi: 10.1016/j.jmr.2012.06.004.

2 RADA, M. Role of vanadium ions on structural, optical and electrochemical properties of the vanadate-lead glasses. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 414, p. 59-65, Apr. 2015. doi: 10.1016/j.jnoncrysol.2015.02.009.

3 STOLL, S.; SCHWEIGER, A. EasySpin, a comprehensive software package for spectral simulation and analysis in EPR. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 178, n. 1, p. 42-55, 2006.

PG48

Novas formas sólidas multicomponentes do fármaco antituberculose (S,S)-etambutol com higroscopicidade reduzida

DINIZ, L. F.[1]; CARVALHO JUNIOR, P. de S.[1]; MELO, C. C. de[1]; ELLENA, J. A.[1]

luanfarinelli@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A tuberculose (TB) é uma doença negligenciada infectocontagiosa com altas taxas de mortalidade, sobretudo em países de baixa renda ou em desenvolvimento. (1) O tratamento da TB é baseado no uso combinado de quatro fármacos: a isoniazida (INH), a pirazinamida (PZA), a rifampicina (RFP) e o etambutol (ETB), num único comprimido. Essa terapia combinada simplifica o tratamento e aumenta as chances de cura. (1) Apesar desses óbvios benefícios, um dos problemas dessa formulação é a alta higroscopicidade do fármaco ETB, que acelera a degradação da INH e da RFP. Essa indesejável característica do ETB tem estimulado o desenvolvimento de novas formas sólidas deste fármaco, uma vez que formas multicomponentes, tais como sais e cocristais, permitem muitas vezes melhorar as propriedades físico-químicas (estabilidade, solubilidade, higroscopicidade, etc.) de um insumo farmacêutico ativo (IFA). (2) Em geral, a formação de sais requer que a molécula do IFA possua grupos ionizáveis na estrutura, para que a reação com coformadores ácidos/básicos levem à formação de compostos carregados. (2) O ETB possui duas aminas secundárias na estrutura, o que permite que o nitrogênio deste grupo funcional seja protonado por ácidos em geral. Essa eficiente estratégia foi utilizada para a formação de novos sais de ETB. A síntese supramolecular dos sais de ETB foi feita a partir da reação deste IFA com os ácidos carboxílicos, farmaceuticamente aceitos (reconhecidos como seguros), oxálico, maleico e tereftálico. Com isso, foram obtidos os seguintes compostos: oxalato de etambutol (ETBOXA), maleato de etambutol (ETBMAL) e tereftalato de etambutol (ETBTRF). Estas novas formas sólidas foram caracterizadas por difração de raios X por mono e policristais, espectroscopia vibracional no infravermelho (IV) e análises térmicas (TGA, DSC e microscopia *Hot-stage*). Além disso, a natureza higroscópica destes sais foi determinada e comparada com a do sal cloridrato de ETB (ETBHCl). Como esperado, após uma hora em atmosfera úmida, o sal ETBHCl teve uma perda de massa relativa de 25% na curva TGA e após oito horas a amostra tornou-se líquida, provando que é altamente higroscópica. Em contrapartida, o novo sal ETBOXA mostrou que não é higroscópico, mesmo quando mantido por 48 horas em atmosfera úmida. A razão para isto está possivelmente relacionada com o arranjo supramolecular do sal ETBOXA que dificulta a entrada e a interação de moléculas de água com a estrutura. O arranjo cristalino deste sal é formado por cadeias de ânions oxalato, que interagem fortemente com as moléculas de ETB, deixando o empacotamento cristalino deste sal bem mais coeso. Diante desses resultados é possível concluir que a abordagem de engenharia de cristais pode ser utilizada com sucesso no desenvolvimento de novas formas sólidas do fármaco ETB com propriedades físico-químicas melhoradas, sobretudo a higroscopicidade.

Palavras-chave: Etambutol. Higroscopicidade. Difração de raios X.

Referências:

1 ZAMAN, K. Tuberculosis: a global health problem. **Journal Health Populational and Nutrition**, v. 28, n. 2, p. 111-113, 2010.

2 WOUTERS, J.; QUERE, L. (Ed.). **Pharmaceutical salts and co-crystals**. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2011. (RSC Drug Discovery Series, n. 16)

PG49

Quantum effects in the cooperative scattering of light by ultracold dilute atomic clouds

ESPIRITO SANTO, T. S. do[1]; BACHELARD, R.[1,2]

tiagosantiago@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Física - UFSCar

We investigate the propagation of light and the induced quantum correlations in an ultracold dilute atomic cloud. The atoms interact between each other, through real and virtual photons, leading to a "cooperative" scattering of light, where macroscopic degrees of freedom emerge. Our system consists in a laser of classical light interacting with a dilute cloud of two-level atoms. We compute the master equation using "exact" simulations thanks to the python module QuTiP (1) and semiclassical simulation with the truncated BBGKY hierarchy. (2) The truncation is taken by means of a cluster expansion to include two-atoms connected correlations. We analyze the propagation of quantum correlations in the cloud and we also study the fluorescence power spectrum, that yields signatures of quantum coherences between the atomic dipoles (collective effects in the Mollow triplet). I'll present results of quantum cooperativity in the fluorescence spectrum, which scale with the resonant optical thickness – additional sidebands and asymmetry in the Mollow triplet. (3) I will also discuss preliminary results for superradiance, subradiance and collective backscattering (CBS).

Palavras-chave: Dilute cloud. Quantum correlations. Fluorescence spectrum.

Referências:

1 JOHANSSON, J. R.; NATION, P. D.; NORI, F. QuTiP 2: a Python framework for the dynamics of open quantum systems. **Computer Physics Communications**, v. 184, n. 4, p. 1234-1240, 2013.

2 PUCCI, L.; ROY, A.; KASTNER, M. Simulation of quantum spin dynamics by phase space sampling of Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon trajectories. **Physical Review B**, v. 93, n. 17, p. 174302-1-174302-10, 2016.

3 PUCCI, L. et al. Quantum effects in the cooperative scattering of light by atomic clouds. **Physical Review A**, v. 95, n. 5, p. 053625-1-053625-9, 2017.

PG50

Biochemical and biophysical characterization of novel GH10 xylanase prospected from a sugar cane bagasse compost-derived microbial consortia

EVANGELISTA, D. E.[1]; KADOWAKI, M. A. S.[1]; MELLO, B. L.; POLIKARPOV, I.[1]

daniloee@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Environmental pressure is promoting development of innovative technologies for production of renewable energy and "green products" from plant biomass residues. (1) These technologies rely on the conversion of the plant cell wall (PCW) polysaccharides into simple sugars by synergic action of several different PCW degrading enzymes. Among these enzymes, xylanases play an important role in hydrolyzing the glycosidic bonds of xylan, a major component of hemicellulose. (2) Furthermore, xylanases currently have wide biotechnological applications, mainly in food and feed sectors, paper and textile industries. (2) Here we characterized a novel xylanase (*Xyn10*) from GH10 family identified in the metatranscriptome of compost-derived microbial consortia. (3) *Xyn10* was cloned, expressed, purified and characterized biochemically. We also determined its low-resolution molecular envelope in solution based on the experimental synchrotron small-angle X-ray scattering data. Our results reveal that *Xyn10* is a monomeric flexible globular enzyme, with a high stability at a broad pH range from 4 to 10 and optimal activity conditions at pH 7 and 40°C. Just 10% of activity loss was observed after the enzyme was incubated for 30 hours at 40°C at pH ranging from 5 to 10. Moreover, *Xyn10* maintained 100% of its initial activity after incubation for 120 hours at 40°C and 51% after incubation for 24 hours at 50°C (pH=7.0). *Xyn10* shows endo-catalytic activity towards xylan and arabinoxylan; it hydrolysed hemicellulose in the branching points, as suggested by the hydrolysis profile measured on HPAEC-PAD. Furthermore, the *Xyn10* kinetic parameters V_{max}, K_m, K_{cat} and $K_{cat}.K_m^{-1}$ were defined for xylan and arabinoxylan substrates and are comparable to other several reported GH10 xylanases.

Palavras-chave: β-1,4-xylanase GH10. Biochemical characterization. Thermal and pH stable. SAXS envelop shape. Compost-derived enzyme.

Referências:

1 ISIKGOR, F.; BECER, C. Lignocellulosic biomass: a sustainable platform for the production of bio-based chemicals and polymers. **Polymer Chemistry**, v. 6, n.25,p.4497-4559,2015.

2 BEG, Q.K. et al. Microbial xylanases and their industrial applications: a review. **Applied Microbiology Biotechnology,** v.56, n.3-4, p.326-38, 2001.

3 MELLO, B. L. et al. Nutrient availability shapes the microbial community structure in sugarcane bagasse compost-derived consortia. **Scientific Reports**, v. 6, p.38781, 2016.doi:10.1038/srep38781.

PG51

Desenvolvimento de técnica combinando fotobiomodulação e radioterapia para otimização da resposta tumoral à radiação ionizante

FARIA, C. M. G. de[1]; INADA, N. M.[1]; KURACHI, C.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

claramgf@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A fotobiomodulação (PBM), técnica usada clinicamente há mais de quarenta anos, consiste na aplicação de luz com o objetivo de modificar processos celulares como proliferação, reparação tecidual e analgesia. Esses efeitos são fortes evidências de que a PBM pode atuar na modulação do ciclo celular e aumento da oxigenação tecidual, fatores determinantes no resultado de um tratamento de radioterapia. Esse tratamento é um dos pilares do tratamento de câncer, sendo utilizada em aproximadamente 50% dos pacientes como modalidade única ou adjuvante. (1) Portanto, nesse projeto, é proposta a investigação da combinação dessas técnicas para desenvolvimento de um protocolo que aumente o dano tumoral e a eficácia do tratamento. Experimentos in vitro possibilitarão o estudo do efeito da PBM na proliferação e ciclo celular e da combinação dessa técnica com radioterapia, utilizando as técnicas de MTT e citometria de fluxo. A partir dessa investigação serão determinados os protocolos a ser analisados in vivo. O modelo tumoral utilizado é de câncer de cavidade oral, com a linhagem humana de carcinoma epidermóide SCC-25, e a indução in vivo será feita em camundongos nude. O objetivo desses experimentos é avaliar a combinação das técnicas em um modelo de maior complexidade biológica, e avaliar dano tumoral e sobrevida dos animais no intuito de propor um protocolo que possa melhorar a resposta tumoral à radiação ionizante.

Palavras-chave: Fotobiomodulação. Radioterapia. Carcinoma epidermóide.

Referências:

1 DELANEY, G.et al. The role of radiotherapy in cancer treatment. **Cancer,** v.104, n. 6, p.1129–1137, 2005.

PG52

Termometria ótica baseada em vidros fluorofosfato dopados com Nd3+

FARIA, W.[1]; CAMARGO, A. S. S. de[1]

walter.faria@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Sensores óticos de temperatura vêm sendo estudados como alternativas aos convencionais sensores de contato. Este último grupo sofre interferência de radiação eletromagnética e portanto sua aplicação em ambientes como estações de energia elétrica e refinarias de óleo é limitada, além de apresentarem um limite mínimo de tamanho que impossibilita seu uso em sistemas biológicos e eletrônicos. Sensores óticos baseiam-se na variação de alguma propriedade luminescente do material que os constituem, materiais estes que podem variar de nanopartículas a vidros, este último sendo o tema deste trabalho que visa a construção de um protótipo de um sensor de temperatura desta categoria. A técnica aqui utilizada é a razão da intensidade de fluorescência (no inglês, FIR) (1) que compara duas emissões provindas de níveis termicamente acoplados do íon emissor. O uso de duas emissões ao invés de apenas uma evita erros de medidas causados por variação da intensidade de excitação ou perdas da intensidade durante a transmissão pelo sistema. Além disso, a razão entre emissões depende da razão entre as populações dos níveis emissores, governadas pela distribuição de Boltzmann, explicitando a dependência com a temperatura. A técnica descrita acima emprega, muita vezes, os íons terras-raras trivalentes. Estes íons são amplamente utilizados em lasers e amplificadores, tendo sido estudados em uma grande variedade de matrizes hospedeiras e muitas de suas propriedades óticas sendo conhecidas. A escolha do neodímio (Nd3+) como íon emissor deve-se a dois fatores: i) as emissões encontram-se na região do infravermelho próximo, região esta onde a absorção de radiação pelo tecido biológico é mínima. Assim, este íon apresenta grande potencial para aplicações médicas; (2) ii) as bandas de emissão apresentam uma separação espectral maior do que as emissões do érbio (Er3+), o principal íon utilizado em sensores deste tipo, diminuindo os efeitos de superposição de bandas e consequentemente reduzindo os erros na determinação da FIR. O material ao qual o neodímio é incorporado, neste trabalho, trata-se de um vidro fluorofosfato desenvolvido no próprio laboratório por uma doutoranda. (3) Este vidro apresenta altas estabilidades mecânica e química, alta solubilidade de dopante, baixas energias de fônon, longos tempos de vida e alta eficiência quântica de fluorescência. O protótipo é composto pela fonte de excitação; suporte fechado para a amostra vítrea, contendo conexões para as fibras óticas de excitação e de coleta de emissão; espectrômetro modular de portátil da Ocean Optics; computador com um software desenvolvido em LabView para controlar a coleta de dados e realizar as medidas de temperatura. Para a calibração do instrumento tem-se também uma placa aquecedora e um termopar que oferecem as temperaturas de referência. Até o momento foram utilizadas amostras codopadas com neodímio e itérbio (Nd3+/Yb3+) devido à grande absorção deste último em 980 nm e à disponibilidade de um laser neste comprimento de onda no laboratório. Uma sensibilidade entre 1.2 e 0.45% K-1 foi obtida para temperaturas entre 300 e 500 K, respectivamente.

Palavras-chave: Termometria. Terras-raras. Vidro.

Referências:

1 WADE, S. A.; COLLINS, S. F.; BAXTER, J. W. Fluorescence intensity ratio technique for optical fiber point temperature sensing. **Journal of Applied Physics**, v. 94, n. 8, p. 4743-4756, 2003.

2 LALLA, E. A. et al. Optical temperature sensor based on the Nd3+ infrared thermalized emissions in a fluorotellurite glass. **Journal of Luminescence**, v. 166, p. 209-214, Oct. 2015. doi: 10.1016/j.jlumin.2015.05.029.

3 GONÇALVES, T. S. et al. Structure-property relations in new fluorophosphate glasses singly-and co-doped with Er3+ and Yb3+. **Materials Chemistry and Physics**, v. 157, p. 45-55, May 2015. doi: 10.1016/j.matchemphys.2015.03.012.

PG53

Análise estrutural e funcional das enzimas Fosfopentomutase e Ribose-fosfato Pirofosfoquinase de Schistosoma mansoni

FERNANDES, A.[1]; SCORTECCI, J. F.[1]; SERRÃO, V. H. B.[2]; MUNIZ, J. R. C.[1]; PEREIRA, H.[1]

adriano.fernandes@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Harvard Medical School (HMS/EUA)

O *Schistosoma mansoni*, parasita causador da esquistossomose, doença endêmica em países subdesenvolvidos, necessita de grande aporte de energia e, portanto, requer uma elevada produção de nucleotídeos para seu metabolismo. (1) Uma estimativa do intenso consumo energético deste parasita pode ser obtida pela relação de consumo que um grama de *Schistosoma* requer noves vezes mais energia que um grama de tecido humano. (2) Esta fantástica capacidade metabólica requer um ativo e eficiente metabolismo de nucleotídeos. É conhecido que o *S. mansoni* depende integralmente da via de salvação de purinas para suprir sua demanda de bases de purina. Ao contrário do metabolismo de purinas, o *S. mansoni* possui tanto a via "*de novo*"com a via de salvação de pirimidinas. (3) As nucleosídeos fosforilases destas vias produzem ribose-1- que é isomerizado a ribose-5-fosfato e posteriormente fosforilado a fosforribosil pirofosfato (PRPP). O PRPP por sua vez é o açúcar precursor para a formação de nucleotídeos neste parasita. Portanto, caracterizar as enzimas envolvidas na síntese de PRPP é de extrema importância para a completa compreensão do metabolismo de nucleotídeos. Este projeto tem como objetivo a clonagem, expressão, purificação, caracterização cinética e biofísica; bem como a determinação e resolução estrutural a partir de estudos de espalhamento de raios-X a baixo ângulo (SAXS) e ensaios de cristalização e de difração de raios-X das enzimas Fosfopentomutase (*Sm*PPM) e Ribose-fosfato Pirofosfoquinase (*Sm*PRPS) envolvidas na a síntese de PRPP. O entendimento da função destas enzimas juntamente com suas constantes catalíticas pode permitir o desenvolvimento de inibidores específicos para enzimas chaves destas vias.

Palavras-chave: Fosforribosil pirofosfato. Schistosoma mansoni. Esquistossomose.

Referências:

1 HOTEZ, P.J. et al. Incorporating a rapid-impact package for neglected tropical diseases with programs for HIV/AIDS, tuberculosis, and malaria. **PLoS Medicine**, v.3, n.5, p. e102,2006.

2 WICHMANN et al. Diagnosing schistosomiasis by detection of cell-free parasite DNA in human plasma. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 3, n.4, p.e422,2009.

3 DOVEY, H.F.; MCKERROW,J. H. ; WANG, C. C. Purine salvage in *Schistosoma mansoni* schistosomules. **Molecular Biochemical Parasitoly,** v. 11, p. 157-67, 1984.

PG54

Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores multi-core

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

felipe2.ferreira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os mais recentes processadores da linha Xeon Phi da Intel comprovam o que as projeções já indicavam: o número de núcleos por processador deve continuar a crescer, potencialmente atingindo o patamar conhecido como many-core, onde o número de núcleos é da ordem de centenas ou até mesmo milhares. (1) Essa tendência de crescimento, embora seja uma solução que gere maior capacidade de processamento bruta, é uma solução que necessita da utilização de técnicas de programação não triviais a fim de garantir a coerência dos dados durante os acessos à memória feitos por núcleos diferentes e a utilização plena de todos os núcleos. (2) É nesse cenário que a busca por novos modelos de execução que diminuam o uso de tais técnicas volta a ser um importante tópico de pesquisa. Os modelos de execução a fluxo de dados têm se mostrado eficientes nesta tarefa: nesses modelos o paradigma de execução é baseado na disponibilidade dos dados, eliminando a necessidade de realizar operações de sincronização e, também devido a esta característica, permitindo que o paralelismo disponível seja extraído implicitamente. (3) O modelo desenvolvido utiliza os conceitos de fluxo de dados através de uma estrutura chamada codelet. Cada codelet possuí três elementos fundamentais: um conjunto de entradas, uma função que é executada com os dados da entrada e um conjunto de saídas. O fluxo de dados é feito quando a saída de um codelet atua como entrada para outro. A função presente no codelet deve possuir granularidade grossa para que os custos de comunicação do fluxo de dados sejam diluídos no custo de execução da mesma. Além disso o modelo é do tipo thread-pool, onde todas as threads existem desde o início da execução do programa e o seu estado depende apenas da disponibilidade de codelets: ou a thread está executando um codelet ou está esperando um codelet ficar disponível para a execução. A análise do modelo é feita considerando a comparação direta com modelos de execução já consolidados no mercado, para isso algoritmos com características diversas são implementados nestes modelos e executados em um simulador validado. A escolha de executar as aplicações em um simulador é simples: além de ser um ambiente controlado e isolado é possível simular processadores de difícil acesso ou que ainda não estão disponíveis no mercado. Os resultados preliminares demonstram que o modelo desenvolvido consegue ser competitivo em relação aos demais, obtendo resultados expressivos, em específico, durante a simulação de processadores do tipo many-core.

Palavras-chave: Modelo de execução. Dataflow. Computação paralela.

Referências:

1 GELSINGER, P. P. Microprocessors for the new millennium: challenges, opportunities, and new frontiers. In: IEEE INTERNATIONAL SOLID-STATE CIRCUITS CONFERENCE, 2001, San Francsico. **Digest of Technical Papers.** Piscataway: IEEE, 2001. v. 44, p. 22-25.

2 ARVIND; IANNUCCI, R. A. A critique of multiprocessing von Neumann style. **ACM SIGARCH Computer Architeture News**, v. 11, n. 3, p. 426-436, June 1983.

3 KYRIACOU, C.; EVRIPIDOU, P.; TRANCOSO, P. Data-driven multithreading using conventional microprocessors. **IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems,** v. 17, n. 10, p. 1176-1188, Oct. 2006.

PG55

Ambientes radioativos naturais como fontes de desequilíbrio químico local e suas potenciais implicações prebióticas

FERREIRA, T. A.[12]; GALANTE, D.[2]

thiago.altair.ferreira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS), Centro Nacional de Pesquisas em Energia e Materiais (CNPEM)

Ambientes subterrâneos profundos de deposição natural de minerais radioativos podem ter tido um papel relevante no processo de emergência de vida e evolução no contexto de ecossistemas Pré-Cambrianos, por proverem energia e os desequilíbrios químicos necessários. Hoje já sabemos que, em ambientes de profundidade com fontes radiolíticas existem espécies microbianas litoautotróficascuja sobrevivência é independente de fotossíntese a partir de luz solar. (1) Propomos avaliar, de forma analítica e numérica, condições físico-químicas e as fontes de energia radiolíticase seus efeitos na habitabilidade destes ambientes no contexto da Terra primitiva, quantificando a parcela da energia biologicamente aproveitável e considerando diferentes fontes de desequilíbrio químico e físico. Isto, tendo em referência a similaridade entre o microambiente alcalino destes ambientes radiolíticos (2) e o de fontes hidrotermais alcalinas modernas (3) , ambientes que já demonstraram potencial para prover a química necessária para o surgimento da vida. (3) A partir deste estudo podemos analisar o potencial para o surgimento nestes ambientes radioativos naturais na Terra primitiva, assim como avaliar, posteriormente, a habitabilidade de análogosem ambientes extraterrestres, como as luas geladas de Júpiter – Europa, Calisto e Ganimedes – principais alvos das próximas grandes missões de busca por vida no Sistema Solar. Os resultados preliminares avançam em sua parte analítica e inicia sua parte numérica para as implicações prebióticas. Além de que já estudamos aplicações em âmbito astrobiológico com modelos terrestres análogos aos da lua gelada Europa. A parte quantitativa relativa aos ambientes radioativos no contexto da terra primitiva, o desequilíbrio consequente da radiólise e a transdução da energia livre para sistemas proto-biológicos serão o alvo dos futuros estudos que encerrarão a abordagem planejada inicialmente a este projeto de pesquisa.

Palavras-chave: Origem da vida.Desequilíbrio termodinâmico. Astrobiologia.

Referências:

1 CHIVIAN, D. et al. Environmental genomics reveals a single-species ecosystem deep within earth. **Science**, v. 322, n. 5899, p. 275–278, 2008.

2 LIN, L..H. et al. Long-term sustainability of a high-energy, low-diversity crustal biome. **Science**, v. 314, n. 5798, p. 479–482, 2006.

3 MARTIN, W. et al. Hydrothermal vents and the origin of life. **Nature Reviews Microbiology**, v. 6, p. 805–814, 2008. doi:10.1038/nrmicro1991.

PG56

Complex networks computational modeling of visual attention.

FERREIRA, S. J. V.[1]; COSTA, L. da F.[1]

silviojvf@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Visual attention is a complex cognitive process where individuals select the most relevant and informative stimuli to understand the environment, thus reducing information processing time and improving interaction skills. Computational modeling approaches to visual attention propose that saliency maps are built from bottom-up visual features in the scene context, highly determining the attentional focus trajectory. Furthermore, these maps may be complemented by top-down cognitive aspects of information processing such as pattern recognition and visual task nature. The majority of saliency maps are obtained through computer vision feature extraction and some of these techniques utilises complex networks characterization of images for saliency map extraction, but we have few studies with a complex networks approach into built saliency maps. (1) In our study we modeled the attentional focus trajectory as a complex network derived from saliency maps of atificial scenes. Salient regions in the scene corresponded to nodes whose connections corresponded to attentional focus displacement probabilities. Connections were weighted both by bottom-up visual feature interactions and top-down pattern recognition and task demands. We studied how topological and dynamic measurement (2) of these complex networks can lead to prediction of attentional focus displacement and compared our approach to traditional saliency models and visual attention literature.

Palavras-chave: Visual attention. Saliency. Complex networks.

Referências:

1 BORJI, A.; ITTI, L. State-of-the-art in viisual attention modeling. **IEEE Transactions on Pattern Analisys and Machine Intelligence**, v. 35, n. 1, p. 185-207, 2013.

2 COSTA, L. da F. et al. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2007.

PG57

Preliminary structural analysis of dna wrapping in bacterial transcription initiation complex by transmission electron microscopy

FLOREZ ARIZA, A. J.[1,2]; CASSAGO, A.[2]; GUERRA GIRALDEZ, D.[3]; PORTUGAL, R. V.[1,2]

alfredo.florez.a@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Laboratório Nacional de Nanotecnologia - CNPEM

[3] Laboratorio de Moléculas Individuales - UPCH

The formation of the bacterial transcription Initiation complex (RP), assembled between RNA polymerase ^{70} holoenzyme (RNAP) and a DNA promoter, is the first step for gene expression. It has been proposed that DNA bending and its wrapping on the surface of *E. coli* RNAP, might facilitate the opening of the transcription bubble necessary for the initiation of gene transcription. (1) Methods such as DNAse assays and AFM analyses for studying the RP complex on the bacteriophage λpR promoter, confirmed that the extensions of those contacts must involve DNA wrapping both upstream and downstream the transcription initiation site. (2) The objective of this study is to obtain a structural model of the complex, using single particle analysis, to evaluate the DNA wrapping length and its position relative to the RNAP. Samples of RP complexes, formed from *E. coli* RNAP and λpR promoter (-100 to +30), were prepared and negatively stained with 2% uranyl acetate on a thin carbon-coated grids. Data acquisition of 500 images was performed in a JEM-2100 (Jeol, Japan) equipped with an F-416 CMOS camera (TVIPS, Germany). Single particle analysis of 27,700 particles was conducted using IMAGIC 4D software (Image Science, Germany) to obtain a three-dimensional model of the RP complex at 25Å resolution. A rigid-body fitting of the RNAP and DNA into the map showed that the -10 and -35 zones of the promoter interact with the σ^{70} subunit. Moreover, it was observed that far DNA downstream and upstream regions (approximately -80 until +20 positions) interact with the two alpha, betha and betha' subunits. The DNA wrapping length was estimated to be $\sim$30 nm. As a result of this study, the wrapping phenomena for the λpR DNA promoter was structurally characterized allowing the definition of the relative position and length of the DNA contact with the protein.

Palavras-chave: Single particle analysis. Transmission electron microscopy. Transcription initiation complex.

Referências:

1 SAECKER, R. M.; RECORD JUNIOR, M. T.; DEHASETH, P. L. Mechanism of bacterial transcription initiation: RNA polymerase - promoter binding, isomerization to initiation-competent open complexes, and initiation of RNA synthesis. **Journal of Molecular Biology**, v. 412, n. 5, p. 754-771, 2011.

2 CRAIG, M. L.; SUH, W. C.; RECORD JUNIOR, M. T. HO. and DNase I probing of E sigma 70 RNA polymerase-lambda PR promoter open complexes: Mg2+ binding and its structural consequences at the transcription start site. **Biochemistry**, v. 34, n. 48, p. 15624-15632, 1995.

PG58

Structural and functional studies of cellulosomal thermophilic glycoside hydrolases involved on lignocellulosic biomass hydrolysis

ALMEIDA, L. R. de[1]; SILVA, W. J. G. da[2]; MUNIZ, J. R. C.[1]

al_leo@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal do ABC - UFABC

The drop of petroleum reserves, the growing energy demand from emerging countries, and the eminent necessity for reducing carbon dioxide emissions indicate the importance for the pursuit of new sources of renewable energy. (1-2) However, such sources must have a real character of effective replacement and not only be complementary to the existing resources. Thus, the bioethanol production by hydrolysis of lignocellulosic biomass, such as sugarcane bagasse, has received considerable attention. (1-2) Due to its potential for development and cost reduction, the enzymatic cellulose hydrolysis can be the key factor for second generation bioethanol production at competitive cost in long term. (1-2) Thermophilical bacteria, such as *Clostridium thermocellum*, produces an extracellular multi-enzyme complex named cellulosome, which has been demonstrating a very high ability for an efficient degradation of cellulosic biomass, in particular the crystalline portion of cellulose. (3) The main objective of this research project is to characterize the cellulosomal beta-glucosidases enzymes from *C. thermocellum* of different glycoside hydrolases (GHs) families, applying structural and biophysical analyses. Considering that purpose, we shall conduct comparative studies, specifically from GH1 and GH3 glycoside hydrolases families. Therefore, it is intended to understand the enzymatic mechanisms of cellulosomal beta-glucosidase, which can form the basis for obtaining enzymes with improved performance on biomass depolymerisation.

Palavras-chave: Lignocellulosic biomass hydrolysis. Glycoside hydrolases. Clostridium thermocellum.

Referências:

1 LIU, J. et al. Systems integration for global sustainability. **Science**, v. 347, n. 6225, p. 1258832-1-1258832-9, 2015.

2 BORNSCHEUER, U.; BUCHHOLZ, K.; SEIBEL, J. Enzymatic degradation of (ligno)cellulose. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 53, n. 41, p. 10876-10893, 2014.

3 DENG, L. et al. Cellulose hydrolysis ability of a Clostridium thermocellum cellulosome containing small-size scaffolding protein CipA. **Journal of Biotechnology**, v. 212, p. 144-152, 2015. doi: 10.1016/j.jbiotec.2015.08.016.

PG59

Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente

FORTUNATO, T. C.[1]; MORIYAMA, L. T.[1]

thereza.fortunato@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Quando a luz incide sobre um tecido biológico, ela pode sofrer diferentes tipos de interação: reflexão, refração, espalhamento, transmissão e absorção. A forma como a luz interage com um tecido depende das características ópticas e estruturais do tecido. (1) Nas fototerapias e nos procedimentos de fotodiagnóstico, a dosimetria é geralmente feita com base em dados empíricos e experiências divulgadas em artigos científicos, pouco se faz para personalizar a dosimetria na prática clínica, embora seja sabido que a cor, hidratação e rugosidade da superfície do tecido possam influenciar na propagação da luz. O trabalho proposto visa utilizar *phantoms* ópticos e tecidos biológicos para avaliar como a luz incidente em superfícies de diferentes características físicas (coloração, hidratação e rugosidade) (2) interage com o meio de propagação, e investigar se meios como água, hidrogel e óleo podem ser utilizados para melhorar o acoplamento e consequentemente aumentar a quantidade de luz que penetra nos tecidos biológicos. Também avaliaremos o uso da técnica de imagem por luz polarizada (3) para a caracterização superficial do tecido, como forma de auxiliar a dosimetria.

Palavras-chave: Fototerapia. Fotodiagnóstico. Dosimetria.

Referências:

1 NIEMIEMZ, M. F. H. **Laser-tissue interactions***:* fundamentals and applications. New York: Springer Science & Business Media, 2013.

2 NUSKIATTI, W. D. A. H. I.; SCHWINDT, D. A. ; MALBACH, H. IInfluence of age, anatomic site and race on skin roughness and scaliness. **Dermatology**, v. 196, n. 4 p. 401-407, 1998.

3 TUCHIN, V. V.(Ed.) **Handbook of optical biomedical diagnostics**. Bellingham: SPIE Press, 2007.

PG60

Perovskitas condutoras de prótons dos sistemas não estequiométricos Ba3Ca1,18Nb1,52R0,3O9 (R = Y, Nd, Sm, Gd): preparação e propriedade

FRANCISCO, L. H.[1]; RODRIGUES, J. E. F. S.[2]; HERNANDES, A. C.[1]

lucas.francisco@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Física - UFSCar

A condução iônica no estado sólido é um fenômeno físico com grande relevância tecnológica por suas aplicações em dispositivos eletroquímicos. (1) Em especial, os condutores de prótons têm sido bastante estudados devido à sua aplicação como eletrólitos em células a combustível, com destaque para os óxidos de estrutura perovskita, ABO_3, onde uma não estequiometria no sítio B dá origem a vacâncias de oxigênio que podem incorporar hidroxilas, levando a uma estrutura cristalina com íons H^+ intersticiais. (2) Um exemplo desses materiais é o $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,52}Y_{0,3}O_{9-\delta}$, (BCNY) que apresenta altos valores de condutividade protônica. (3) O objetivo deste trabalho é o estudo das propriedades físicas de materiais com composição derivada do BCNY pela substituição do Y^{3+} por diferentes íons de mesma valência. Essa substituição permite verificar o efeito do elemento químico nas propriedades do material final. Para o estudo, pós cristalinos de $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,52}R_{0,3}O_{9-\delta}$ com $R = (Y, Nd, Sm, Gd)$ foram sintetizados por reação em estado sólido e usados para a fabricação de corpos cerâmicos densos. Difração de raios-x realizada nos pós e cerâmicas forneceu os parâmetros de rede e demonstrou a obtenção da fase desejada para os materiais. Expressões analíticas obtidas para o fator de estrutura dos sistemas estudados demonstraram que a presença das reflexões observadas no padrão de difração experimental são assinatura de um ordenamento estrutural do tipo 1:1 nas perovskitas trabalhadas. A caracterização elétrica foi feita por espectroscopia de impedância, realizada em um intervalo de frequências de 100mHz a 1MHz e em temperaturas entre 30°C e 500°C. Informações microestruturais obtidas via microscopia eletrônica de varredura foram aplicadas à análise dos espectros de impedância com o auxílio de uma modelagem por circuitos equivalentes. Essa abordagem permite separar as propriedades elétricas de grão e contorno de grão para a impedância dos materiais cerâmicos. Os resultados mostram que as propriedades elétricas foram alteradas pelas substituições e que as contribuições de grão e contorno têm dependências diferentes com o elemento químico escolhido para a substituição. Um modelo de cargas espaciais foi aplicado relacionando a impedância de contorno de grão à presença de uma barreira Schottky na região próxima aos contornos. Espectroscopia Raman realizada próxima à superfície de amostras seccionadas mostrou uma distribuição espacial de modos vibracionais. Mapeamentos feitos em amostras secas e expostas a vapor de água buscam verificar a influência da hidratação nesses modos e futuras análises objetivam compreender essa distribuição e sua relação com as propriedades elétricas dos materiais.

Palavras-chave: Perovskita. Espectroscopia de impedância. SOFC.

Referências:

1 FUNKE, K. Solid state ionics: from Michael Faraday to green energy - the European dimension. **Science and Technology of Advanced Materials**, v. 14, n. 4, p. 43502-1-43502-50, 2013.

2 SOUZA, E. C. C.; MUCCILLO, R. Properties and applications of perovskite proton conductors. **Materials Research**, v. 13, n. 3, p. 385-394, 2010.

3 WANG, S. et al. Novel chemically stable Ba3Ca1.18Nb1.82-xYxO9-δ proton conductor: improved proton conductivity through tailored cation ordering. **Chemistry of Materials**, v. 26, n. 6, p. 2021-2029, 2014.

PG61

Spatial dynamics of ecosystem engineers: a coupled map lattice approach

FRANCO, C.[1]; FONTANARI, J. F.[1]

caroline.franco@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Ecosystem engineering refers to the ability of certain organisms to actively modify their surrounding environment. In an ecological context, ecosystem engineers are keystone species that modify or create habitats via mechanical means or by using their own physical structures. By creating new niches, beavers, coral reefs and primitive human societies would guarantee both their and other species survival in a shared ecosystem. Due to its long-lasting character, some of this changes might outlive the engineers populations, leading to evolutionary consequences. (1) Regardless, the theoretical study of such ecological phenomena is relatively recent when compared to the description of predator-prey or competition interactions. (2) Only in 1996 Gurney ¨" Lawtons (3) introduced a model to describe the population dynamics of ecosystem engineers, yet since then few modifications appeared. Here we build on this model by allowing the engineers to move diffusively through the patches of a coupled map lattice, a framework discrete both in time and space. The local stability analysis reveals the existence of stable, cyclic and chaotic regimes, with period-doubling bifurcations leading to chaotic orbits. We find that only for large intrinsic growth rates, where chaotic behavior occurs, dispersal influences the metapopulation dynamics. In this regime, chaos is suppressed and extinction can be avoided.

Palavras-chave: Ecosystem engineering. Population dynamics. Coupled map lattice.

Referências:

1 HASTINGS, A. et al. Ecosystem engineering in space and time. **Ecology Letters**, v. 10, n. 2, p. 153-164, 2007.

2 LOTKA, A. J. **Elements of physical biology**. Baltimore: Williams and Wilkins Company, 1925.

3 GURNEY, W. S. C.; LAWTON, J. H. The population dynamics of ecosystem engineers. **Oikos**, v. 76, n. 2, p. 273-283, 1996.

PG62

Expansão anômala observada em condensado de Bose-Einstein fora do equilibrio

GARCÍA, A.[1]; FRITSCH, A.[1]; TELLES, G. D.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

arnolgarcia@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O condensado de Bose-Einstein (BEC) é um sistema versátil para estudar desde ciência básica até teoria avançadas. O BEC permite fazer estudos de sistemas quântico em uma escala macroscópica. Uma característica do BEC é que sua forma sempre é proporcional ao potencial invertido onde é produzido. Na maioria dos casos, o BEC é obtido em uma armadilha harmônica, porém, o perfil de densidade é bem descrito por uma função parabólica. No entanto, uma vez que o BEC é alcançado em temperaturas finitas, a transição de fase é sempre acompanhada de átomos térmicos cujo perfil de densidade obedece a uma função Gaussiana. Sem embargo a característica da expansão atômica é diferente para uma nuvem turbulenta ou quando o BEC é forçado a se expandir em um potencial desordenado. No último caso, uma importante previsão conhecida como Localização de Anderson (AL) foi observada recentemente. (1-2) Quando o BEC é mantido em um potencial desordenado, sua expansão revela uma mudança no perfil, e o rabo do perfil da nuvem muda de uma função gaussiana para uma decaimento exponencial. Neste trabalho apresentamos estudos que caracterizam um sistema fora do equilíbrio, o qual é obtido através da excitação de um BEC de Rb^{87} obtido em uma armadilha magnética do tipo QUIC. Logo após o condensado ser obtido, o mesmo é excitado usando um campo magnético oscilatório superposto ao campo magnético da armadilha harmônico gerado por duas bobinas em direção axial ao BEC. Usando a técnica de imagem em tempo de voo é obtido obtemos o perfil de densidade a partir das imagens de absorção. Do rabo do perfil das nuvem é obtido o expoente . O valor do expoente foi obtido analisado para diferentes tempo de espera e energia bombeada. Os resultados mostram uma variação no rabo do perfil que o sistema mostra um perfil exponencial.

Palavras-chave: BEC. Localização de Anderson. Perfil de densidade

Referências:

1 ROATI, G. et al. Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate. **Nature**, v. 453, n. 7197, p. 895-898, 2008.

2 SANCHEZ-PALENCIA, L. et al. Anderson localization of expanding Bose-Einstein condensates in random potentials. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 21, p. 210401-1-210401-4, 2007.

PG63

Correlation functions on random spin-1/2 chains: from scaling relations to nonlocality

GETELINA, J. C.[1]; HOYOS, J. A.[1].

getelina@ursa.ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The calculation of correlation functions of theoretical models establishes an important connection between theory and experiment since these quantities are related to response functions which, in principle, can be measured experimentally. In addition, novel behaviors of correlation functions may be observed if the system properties are changed. For instance, it has been shown that by introducing randomness, i.e. impurities or defects, one can observe highly-correlated entities which are absent on the homogeneous system. (1) Therefore, in this work, we perform a thorough study of spin-spin correlation functions on the random XX spin-1/2 chain. This model can be mapped into a tight-binding model of free fermions, (2) which allows us to investigate relatively large chains via an exact numerical diagonalization. In this work, we have studied the scaling relations of correlation functions and the violation of Bell inequality. Regarding the first subject, we show that our data is in good agreement with the scaling relations predicted from the strong-disorder renormalization group approach. (3) Regarding the violation of Bell inequality, we show that, quite distinct from the pure chain, nonlocal correlations are observed between spin pairs which can be arbitrarily separated.

Palavras-chave: Correlation functions. Disordered systems. Spin chains.

Referências:

1 HOYOS, J. A.; RIGOLIN, G. Quantum channels in random spin chains. **Physical Review A**, v. 74, n. 1, p. 062324, 2006.

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

3 FISHER, D. Random antiferromagnetic quantum spin chains. **Physical Review B**, v. 50, n. 6, p. 3799–3821, 1994.

PG64

Análise da aplicabilidade de modelos neuronais na simulação de redes neuronais artificiais

GEWERS, F. L.[1]; COSTA, L. da F.[1]

felipe.gewers@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Nota-se, ao longo das últimas décadas, um crescente interesse em simulação de redes neurais utilizando-se conceitos e métodos mais completos e integrados, incluindo processamento de sinais, estatística e reconhecimento de padrões. Em boa parte, motivados por descobertas biológicas, a maioria desses estudos considera uma rede de neurônios interligados interagindo um com outro através de potenciais de ação, que constitui um dos principais aspectos do processamento das redes neurais biológicas. Portanto, estudos envolvendo a simulação de redes neuronais necessitam de modelos de neurônios fundamentados na representação e processamento dos estímulos de entrada em termos de composições de potenciais de ação, alterados por não-linearidades e, eventualmente, ruído. O presente trabalho busca o desenvolvimento de caracterização e modelagem de neurônios individuais e em grupo em termos de conceitos de processamento de sinais, função de transferência, conceitos de eletrônica, sistemas dinâmicos e estatística multivariada. (1) Nesta apresentação, faremos uma breve revisão dos modelos neuronais mais frequentemente utilizados que poderão servir como base para nossos estudos, incluindo, em ordem progressiva de complexidade e custo computacional: integra-e-dispara (2), Izhikevich (3), Fitzhugh-Nagumo e Hodgkin-Huxley. Embora, em princípio possamos almejar o maior grau de realismo biológico, isto também implica em custo computacional maior, que pode dificultar simulações e análises de sistemas formados por muitos neurônios. Portanto, tentaremos identificar as vantagens e desvantagens de cada um destes modelos, e quais os problemas aos quais eles mais se adequam.

Palavras-chave: Redes neurais. Modelos de neurônio biológico.

Referências:

1 ANDREW, A. M. Spiking neuron models: Single neurons, populations, plasticity. **Kybernetes, v.** 32, n..7/8, 2003.**doi:** 10.1108/03684920310483289.

2 BURKITT, A. N. A review of the integrate-and-fire neuron model: I. homogeneous synaptic input. **Biological Cybernetics, v.** 95, n.1, p.1-19, 2006.

3 IZHIKEVICH, E. M.Which model to use for cortical spiking neurons? **IEEE Transactions on Neural Networks,** v.15, n.5, p. 1063-1070, 2004.

PG65

Perfil do índice de refração não linear do "Gorilla Glass"

GOMES, J. A. C.[1]; BARBANO, E. C.[1]; ZÍLIO, S. C.[1]; MISOGUTI, L.superscript1

jorge_coura@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O "Gorilla Glass", desenvolvido pela Corning, é um vidro alcali-aluminosilicato projetado para ser fino, leve e especialmente resistente a danos e riscos. Esta resistência se deve a um tratamento químico ("têmpera" química) do vidro que consiste na troca de íons de sódio por potássio na superfície do vidro. Como os íons de potássio são maiores do que os íons de sódio, a superfície do vidro estará em um estado de compressão, semelhante ao que acontece com os vidros temperados tradicionais. Em um posto de vista óptico é interessante saber se este tratamento químico altera o índice de refração linear e não linear do material. Neste estudo, propomos mapear o índice de refração não linear, n_2 , do "Gorilla Glass" utilizando a técnica da rotação não linear da polarização elíptica (RNLPE) (recentemente desenvolvemos um novo método simples para determinar com precisão o sinal da RNLPE usando um amplificado *lock-in* de fase dupla na condição de feixe fortemente focalizado (1)), que tem a capacidade de mapear localmente n_2 de um material. Para estas medidas foi utilizado pulsos de laser de um sistema amplificado de Ti:Safira de 150 fs, com taxa de repetição de 1 kHz centrados em um comprimento de onda de 775 nm. Foi obtido o perfil do valor de n_2 do "Gorilla Glass" utilizando a técnica da RNLPE. Foi observado que este vidro tem menor valor de n_2 na superfície em comparação com sua parte mais interna. Foram utilizadas amostras de sílica e vidro comum (lamínula de microscopia) para calibração da não linearidade. Outros vidros quimicamente "temperados" também foram caracterizados.

Palavras-chave: Alcali-aluminosilicato. Índice de refração não linear. Rotação da polarização elíptica.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L. et al. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick sample. **Applied Physics B**, v. 120, n. 4, p. 653-658, 2015.

PG66

Characterization of nonlinear optical properties of chalcones derivatives and schiff-base molecules

GOTARDO, F.[1]; COCCA, L. H.Z.[1]; FONSECA, R. D.[1]; OLIVEIRA, G. D. C.[2]; PEREZA, C. N.[2]; CUSTODIO, J. M. F.[2]; NAPOLITANO, H. B.[3]; ROMUALDO, L. L.[4]; MESQUITA, G. M.[4]; DE BONI, L.[1]

fernando.gotardo@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química - Universidade Federal de Goiás

[3] Universidade Estadual de Goiás - Campus Anápolis de Ciências Exatas e Tecnológicas

[4] Departamento de Química - Universidade Federal de Goiás Regional Catalão

In the present study, nonlinear optical measurements were performed in four imines derivatives and nine chalcones derivatives by using two different techniques: Hyper Rayleigh Scattering (HRS) (1) and Z-scan experiment (2) at the femtosecond regime to obtain the two-photon absorption (2PA) spectrum. Schiff base molecules are considered a sub-class of the organic group imines . The molecules studied here were synthesized by the reaction of an amine and an aldehyde. They can be applied in organic electronics, as in perovskite solar cells and organic field-effect transistor. The nonlinear optical results, 2PA and first-order nonlinear scattering, have shown that these shiff-base structures present considerable nonlinear optical effects. The HRS results increase as the one-photon band is red-shifted. In other words, when in energy the lowest one-photon band approaches to the energy of the photon emitted by the laser. The 2PA results demonstrated that the lowest one-photon band is less allowed by a two-photon transition. Additionally, a new electronic band appears in a energy range higher than the energy of one-photon band and it is strong allowed by 2PA, which is observed by the higher magnitude of the 2PA cross section when compared to onephoton band. Chalcones are relatively easy to synthesize in laboratory and are being idely used in medical activities as antibacterial, antiviral, antioxidative, and many more. These molecules present low toxidity, and high potency. The characteristic of easy reaction with alkaline substances brings the ttention of academic and industry research. Besides that, chalcones present good responses to nonlinear optics experiments. In this way, a complete study on nonlinear optics was performed in order to understand more the influence of different donor-acceptor groups attached to a conjugated chalcone main molecular structure. It was observed that the 2PA spectrum follow the same rule observed in the UV-Vis spectrum, which was a shift in wavelength accordantly to the strength of the donor-acceptor charge groups. Additionally, the magnitude of the nonlinear effects is also affected by this behavior, in which an increase of the 2PA or HRS signals was observed when the energy of the photon approached to the real electronic one-photon transition. Even though the changes in charge groups modified the photophysical properties of the chalcones, all these molecules presentd a considerable 2PA cross section and a first order hyperpolarizability compared to the known standard organic samples.

Palavras-chave: Two-photon absorption. Nonlinear optics. Z-scan. Hyper-Rayleigh scattering. Chalcone. Schiff-base

Referências:

1 CLAYS, K.; PERSOONS, A. Hyper-rayleigh scattering in solution. **Review of Scientific Instruments**, v.63, n.6, p. 3285-3289, 1992.

2 SHEIK-BAHAE, M.; SAID, A..A.; VAN STRYLAND, E.W. High-sensitivity, single-beam n2 measurements, **Optics Letters, v.** 14, n. 17, p.955-57,1989.

PG67

Desenvolvimento de um sistema portátil de detecção de linfonodo sentinela.

GOVONE, A. B.[1]; BEVILAQUA, J. L. B.[2]; BARROS, A.[2]; PINCERATO, K.[2]; COS, P. A.[2]; BAGNATO, V. S.[1]; RAMOS, M. L.[2]; KURACHI, C.[1]; ROSA, R. G. T.[1]; CASTRO NETO, J. C. de[1]

govone.angelo@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Hospital Sírio Libanês - SP

A necessidade de rastrear linfonodos sentinela à tumores sólidos, no momento da cirurgia de ressecção tumoral, tem aumentado a demanda por sistemas de rastreamento cada vez mais eficientes. Tais equipamentos estão em constante evolução, sendo possível observar o surgimento de novas técnicas para rastreamento. Dentre elas, o emprego de técnicas de fluorescência têm aumentado com a melhora na qualidade da imagem gerada pelos sistemas e o desenvolvimento sistemas coloridos. Dando seguimento ao trabalho de mestrado (1) - que foi desenvolver um sistema de rastreamento de linfonodos sentinela - a proposta agora é desenvolver um sistema portátil, capaz de gerar imagens coloridas, em alta definição e sem fios. O equipamento encontra-se em desenvolvimento em parceria do Grupo de Óptica do IFSC com o Hospital Sírio Libanês, onde ocorrerão os testes comparativos. Os testes no Hospital serão comparando este sistema com um modelo comercial afim de comparar a sensibilidade e precisão do protótipo em cirurgias de rastreamento de linfonodos sentinela guiadas por fluorescência do marcador indocianina verde.

Palavras-chave: Fluorescência. Linfonodo sentinela.

Referências:

1 GOVONE, A.B. **Desenvolvimento de um sistema de imagem de campo amplo de fluorescência para localização de linfonodo sentinela empregando a indocianina verde.** 2016. 88p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

PG68

Crystallographic studies of ElrR, a transcriptional regulator of ElrA, a virulence factor of Enterococcus faecalis, and indications of it interaction with DNA fragment.

DE GROOTE, M. C. R.[1]; CAMARGO, I. L. B. C.[1]; HORJALES, E.[1]; REPOILA, I.[2]; SERROR, P.[2]

mdegroote@ursa.ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto Francês de Pesquisa Agronômica - INRA

The growing knowledge of the commensal saprophyte bacteria ways of communication, control and regulation brings possibilities on the advance at control of the hospital-acquired infections that causes significant losses in public health all over the world. A described a transcriptional regulator (TR), ElrR, that positively regulates the virulence factor of *Enterococcus faecalis*, the transcription of elrA gene (a virulence factor of *Enterococcus faecalis*). (1) The high similarity of the ElrA with the Listeria monocytogeneis internalins provides support to host invasion by the bacteria. ElrR are considered to belonging to Rgg like RT family, exclusive of gram positive bacteria. Several reasons include the Rgg family into the RNPP superfamily, generating the superfamily RRNPP of RT. (2) The RRNPP are part of a regulation system by quorum sensing (QS), a communication system cell-cell based on cellular density with association function on the activation or inhibition of the proteins expressions that are related to virulence, biofilm formation, sporulation and others. (3) To improve the knowledge about the mechanism ways of genes transcriptions activations of the ElrA virulence factor, this work shows heterologous expression achievement, in *E. coli*, and purification of the proteins ElrR and ElrA, as well as biophysics experimentation to characterize some structural and biological features of both proteins. Using chromatography, circular dichroism (CD), fluorescence anisotropy, dynamic light scattering (DLS), X ray crystallography and surface plasmon resonance (SPR) technics, it was possible to obtain the tridimensional structure of ElrR, the ElrR-DNA complex formation evidence, confirming DNA interaction site of ElrR, with a 25 bp fragment. In collaboration with PhD Pascale Serror we attempted to achieve the auto-induction (AI) molecule of ElrR. Also are presented the first results of the heterologous obtainment of ElrA. The purification and crystallization of the ElrA presents important characteristics with will allow the investigation continuity of this virulence factor. ElrR is composed by alpha-helices presenting dimeric fold in solution. Despite the similarity between the RRNPP members, the low identity of ElrR to the other members motivates the experimental crystallographic phases solution. ElrR structure are very similar to the homologous structures, presenting a higher interface between the protomers that composes the dimer. It AI binding site is wider than the other structures studied, conserving several amino acid residues, presented at the homologous, that stabilizes the AI molecule. High temperature factors of the Amino acid residues showed in all the obtained ElrR crystallographic structures, adding the anisotropy of the atoms, in one of those structures, shows the high flexibility of this TR. The evidence of the ElrR-DNA complex here showed, obtained by SPR and fluorescence anisotropy, indicates that ElrR link at the DNA purposed site, even in the absence of the AI molecule. Not obtainment of the ElrR-DNA complex crystals added the high flexibility presented at some places of the structure and the observed instability at the

formed complex (observed at SPR) suggests the mandatory need of the AI molecule to create a stable ElrR-DNA complex.

Palavras-chave: Crystallography. Transcriptional regulator. RRNPP.

Referências:

1 DUMOULIN, R. et al. Enterococcal Rgg-like regulator ElrR activates expression of the *elrA operon*. **Journal of Bacteriology**, v. 195, n. 13, p. 3073-3083, 2013.

2 DO, H.; KUMARASWAMI, M. Structural mechanisms of peptide recognition and allosteric modulation of gene regulation by de RRNPP family of quorum-sensing regulators. **Journal of Molecular Biology,** v. 428, n. 14, p. 2793-2804, 2016.

3 MASHBURN-WARREN, L.; MORRISON, D. A.; FEDERLE, M. J. A novel double-tryptophan peptide pheromone controls competence in *Streptococcus spp.* via an Rgg regulator. **Molecular Microbiology**, v. 78, n. 3, p. 589-606 , 2010. doi: 10.1111/j.1365-958.2010.07361.x.

PG69

Correlation effects in the emergence of Bound State in the Continuum

GUESSI, L. H.[1]; SERIDONIO, A. C.[2]; OLIVEIRA, L. N. de[1]

lhbguessi@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos – USP

[2] Departmeno de Fisica e Quimica – UNESP/Ilha Solteira

In 1929, a nontrivial solution of the Schrödinger equation proposed by von Neumman and Wigner originates a new class of states that have localized wave function, even though they are immersed in a continuum. Such states emerge due to destructive interference between two or more scattering waves. In condensed matter theory, BICs are typically found in systems with parity symmetry, and they occur due to the perfectly destructive interference between two resonances phase-shifted by . As an example we highlight the theoretical investigation of BICs in graphene for a pair of impurities adsorbed in a T-shaped geometry in the center of the hexagonal cell. We emphasize the emergence of BICs due to the Fano destructive interference assisted by the Coulomb interaction in the impurities in an improved mean-field framework, the so-called Hubbard I approximation. (1) In this work, we investigate theoretically the emergence of BICs in a pair of quantum dots (QDs) side-coupled to a quantum wire. (2) Due to the symmetry of the system, we mapped the QDs levels onto a pair of orbitals: a bonding and an anti-bonding orbital. We propose a new mechanism to investigate the emergence of BIC, based on the Numerical Renormalization Group (NRG) and in the z-averaging procedure proposed by Oliveira and Oliveira. (3) The authors introduce a new discretization parameter z that run over the entire conduction band, with $0 < z \leq 1$. Increasing z, the states of the conduction band that hybridized with the impurities are close to the Fermi level and, as a consequence, the eigenvalues of the Hamiltonian decreases exponentially. By contrast, given that BICs are decoupled to the continuum, their energy must remains constant as a function of z. Based on this mechanism, we observe in the non-interacting case that the anti-bonding orbital are totally decoupled from the continuum. In the interacting limit, our preliminary results point out that the BIC disappears. Hence, this discovery pushes us to face up our previous theoretical findings and to elucidate inevitably the true underlying mechanism of such peculiar state. Supported by the FAPESP (2015/26655-9).

Palavras-chave: Bound State in the continuum. Quantum dot. Numerical renormalization group.

Referências:

1 GUESSI, L. H. et. al. Catching the bound states in the continuum of a phantom atom in graphene. **Physical Review B**, v. 92, n.4, p.045409, 2015.

2 SERIDONIO, A. C.;YOSHIDA, M. OLIVEIRA, L. N. Thermal dependence of the zero-bias conductance through a nanostructure. **Europhysics Letters,** v.86,n.6, p.67006,2009.

3OLIVEIRA, W. C.;OLIVEIRA, L. N. Generalized numerical renormalization-group method to calculate the thermodynamical properties of impurities in metals. **Physical Review B**, v. 49, n. 17,p.11986,1994.

PG70

Optical nonlinearities in microstructures produced by two-photon polymerization

HENRIQUE, F. R.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]

francielerenata@gmail.com

[1] Instituto de Física d São Carlos - USP

In recent years, the advent of integrated photonics led to the development of different photonic devices whose functionalities can be applied in a variety of fields, spanning from telecommunications to biology. The incorporation of polymeric microstructures to photonic devices is interesting because of their ease of functionalization with different compounds. This feature enables the introduction of different physical properties to the system. Furthermore, by means of the two-photon polymerization technique, polymeric microstructures can be produced with high resolution (1), contributing to the devices compactibility. In recent years, the study of linear optical properties of microstructures doped with different materials has received a great deal of attention. (2) However, studies regarding the polymeric microstructures nonlinear optical properties are still scarce because of the difficulty in applying the typical nonlinear characterization techniques to structures with such reduced dimensions. The objective of this project is to produce polymeric microstructures containing nonlinear organic compounds (such as azoaromatic compounds and perylenes) and investigate their nonlinear optical properties. The microstructures will be produced by two-photon polymerization and a Dispersive Scan (D-scan) (3) system will be built to allow the study of their nonlinear optical properties. In this technique the third order nonlinearity of a medium is determined through the spectral changes of a femtosecond pulse as it propagates along a sample, as a function of the dispersion introduced by a dispersive line. In this work we present preliminary results regarding the implementation of the D-scan system and the nonlinear characterization of waveguides produced in Gorilla® Glass. The development of this project will allow the nonlinear characterization of polymeric microstructures, allowing their further incorporation to on-chip devices.

Palavras-chave: Nonlinear optics. Photonics.

Referências:

1 MARUO, S.; NAKAMURA, O.; KAWATA, S. Three-dimensional microfabrication with two-photon-absorbed photopolymerization. **Optics letters**, v. 22, n. 2, p. 132-134, 1997.

2 HENRIQUE, F. R.; MENDONÇA, C. R. Local excitation and collection in polymeric fluorescent microstructures. **Optical Materials**, v. 54, p. 176-180, Apr. 2016. doi: 10.1016/j.optmat.2016.02.020.

3 LOURADOUR, F. et al. Dispersive-scan measurement of the fast component of the third-order nonlinearity of bulk materials and waveguides. **Optics letters**, v. 24, n. 19, p. 1361-1363, 1999.

PG71

Conversão de 5-hidroximetilfurfural por enzimas oxidativas de fungo

HIGASI, P.[1]; KADOWAKI, M. A. S.[1]; POLIKARPOV, I.[1]

paulahigasi@yahoo.com.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Biorrefinarias buscam utilizar biomassa para produção de combustíveis e produtos químicos de alto valor agregado, em substituição as refinarias de petróleo. O ácido furandicarboxílico (FDCA) foi considerado, em relatório do Departamento de Energia dos Estados Unidos, como um dos 12 principais produtos químicos derivados da biomassa. (1) FDCA é produzido principalmente a partir da oxidação sequencial de 5-hidroximetilfurfural (HMF) que, assim como o furfural, é um subproduto do pré-tratamento químico da biomassa. No entanto, a oxidação industrial de HMF a FDCA depende de metais pesados e gera resíduos prejudiciais ao meio ambiente, e práticas "verdes" vêm sendo investigadas, como as oxidoredutases envolvidas na degradação da lignina, como lacases, peroxidases e oxidases. (2) O objetivo do trabalho foi expressar e utilizar as enzimas aril-alcool oxidase (MtGloA e AnGlo) e glioxal oxidase (MtGlox) na oxidação em cascata de HMF a FDCA. As enzimas MtGloA e MtGlox, ambas de *Myceliophthora thermophila* foram expressas em *Aspergillus nidulans* e purificadas por cromatografia de troca iônica fraca e de exclusão molecular. As atividades de aril-álcool oxidase de MtGloA e AnGlo, e de glioxal oxidase de MtGlox foram testadas utilizando álcool veratrílico e metilglioxal, respectivamente. Em teste de atividade acoplado a peroxidase e AmplexRed, foi comprovado que as três enzimas estudadas são capazes de usar O_2 molecular como aceptor de elétrons, e geram H_2O_2 como subproduto. A capacidade das enzimas de usar HMF como substrato foi testada em reações *overnight*, e os produtos avaliados por meio de cromatografia líquida em alta pressão (HPLC). Todas as três enzimas são capazes de oxidar HMF a diferentes produtos. Em altas concentrações de HMF, o único produto de reação de MtGloA e MtGlox detectado foi diformilfurano (DFF). No entanto, quando a concentração de HMF foi diminuída, além de DFF também foi detectado o produto de sua oxidação, o ácido formilfuróico (FFCA). A respeito da reação de AnGlo com HMF, o único produto detectado foi FFCA, e quando o substrato foi reduzido, notou-se a presença também de ácido furandicarboxílico.Em conclusão, as enzimas MtGloA, AnGlo e MtGlox aceitam HMF como substrato, e os produtos formados indicam que aceitam álcoois e aldeídos aromáticos, sendo capazes de realizar oxidações sequenciais. A única enzima cuja reação a partir de HMF resultou em FDCA foi AnGlo. Ajustes na sequência e condições de reação têm potencial de resultar na formação de FDCA, um composto que pode ser usado, por exemplo, na síntese do polímero similar a PET, polietileno furanoato. A utilização de enzimas oxidativas em biorrefinarias têm grande potencial biotecnológico de tornar a fabricação de produtos químicos mais limpa e menos prejudicial ao meio ambiente.

Palavras-chave: Aril-álcool oxidase. Glioxal oxidase. Hidroximetil furfural. Ácido furandicarboxílico.

Referências:

1 WERPY, T.; PETERSEN, G. **Top value added chemicals from biomass : r**esults of screening for potential candidates from sugars and synthesis gas. Washington, DC: Department of Energy, 2004. v.1.p.76.

2 MARTÍNEZ, A. T. et al. Oxidoreductases on their way to industrial biotransformations. **Biotechnology Advances**, 2017. Disponível em: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0734975017300629>. Acesso em: 28 ago.2016.

PG72

Misturas de gases ultrafrios diluídos

HUAMANI CHAVIGURI, J. R.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; CARACANHAS, M. A.[1]

riuspsc@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Tendo em vista a observação de vórtices e turbulência em nossos experimentos envolvendo condensado de átomo alcalino Rb-87 (1), além do experimento da mistura de duas espécies atômicas, Na e K, que está sendo implementado em nosso laboratório, neste trabalho nos concentramos em explorar certas característica da nuvem atômica neste regime quântico com o propósito inicial de dar suporte ao nosso grupo de pesquisa experimental. Consideramos dois condensados de Bose-Einstein, espacialmente sobrepostos, para analisar efeitos da interação entre as espécies na presença de vórtices. O significativo desbalanço entre o número de átomos das duas espécies nos permitirá extrair solução analítica das equações acopladas de Gross-Pitaevskii (GPE). Juntamente com simulações numéricas da GPE, essas soluções serão utilizadas para o estudo das propriedades dinâmicas e do equilíbrio termodinâmico desse sistema composto. (2,3)

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Equação de Gross-Pitaevski. Rede de vórtices.

Referências:

1 HENN, E. A. L. et al. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301, 2009.

2 NISHIDA, Y. Induced p-wave superfluidity in two dimensions: Brane world in cold atoms and nonrelativistic defect CFTs. **Annals of Physics**, v. 324, n. 4, p. 897, 2009.

3 NISHIDA, Y. Phases of a bilayer Fermi gas. **Physical Review A**, v. 82, n. 1, p. 011605(R), 2010.

PG73

Development of low-cost biosensors for cancer biomarkers detection

IBÁÑEZ-REDIN, G. G.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de;[1] GONÇALVES, D.[1]

gipi1908@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Cancer is the term used to define a group of diseases characterized by the abnormal and uncontrollable growth of cells which can lead to tumors formation. (1) Cancer diagnosis at early stages is crucial for the implementation of successful treatments, which has prompted the development of different methodologies involving imaging technics and biomarkers detection. (1,2) Electrochemical and electrical biosensors have emerged as a promising tool for developing sensitive and accurate measurement of cancer biomarkers for being fast, selective and easy to handle when compared to most traditional methods. (3) However, despite the great potential of these devices, limitations as their high production cost need to be overcome before their adoption as methodology for cancer diagnosis and monitoring. In this project, we proposed the development of low-cost biosensors for detecting cancer biomarkers using screen-printed electrodes (SPEs) fabricated over cost-effective substrates. We propose the use of low cost materials as carbon black (CB) and metallic nanoparticles for biomolecules immobilization and to improve the device sensitivity. In a first approach, an electrochemical immunosensor to detect pancreatic cancer antigen CA 19-9 was developed using screen printed carbon electrodes (SPCEs). Flexibles SPCEs were fabricated over poly(ethylene terephthalate) (PET) and modified with films of carbon black (CB) and positively and negatively charged polyelectrolytes using layer-by-layer assembly. The effect of CB and polyelectrolytes concentration as well as the adsorption time was studied by using differential pulse voltammetry (DPV) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS). Under optimized conditions a layer of anti-CA19-9 antibodies was adsorbed at the modified electrode surface and CA19-9 antigen was label-free detected with a limit of detection of 0.093 U mL^{-1}. The proposed biosensor represents a novel, easy to fabricate and low-cost alternative for cancer biomarkers detection.

Palavras-chave: Immunosensors. Cancer. Protein biomarkers. CA 19-9. Carbon black. Screen-printed electrodes.

Referências:

1 WU, L.; QU, X. Cancer biomarker detection: recent achievements and challenges. **Chemical Society Reviews**, v.44, n.10, p.2963-2997, 2015.

2 SARKAR, S.;Das, S. A review of imaging methods for prostate cancer detection. **Biomedical Engineering and Computational Biology,** *v.7*, Suppl 1,p.1-15, 2016.

3 BOHUNICKY, B.; MOUSA, S. A. Biosensors: the new wave in cancer diagnosis. **Nanotechnology, Science and Applications,** v.4, p.1-10,.2011.doi: 10.2147/NSA.S13465.

PG74

Fundamentos matemáticos das fases geométricas

ISRAEL, I.[1]; MAIA, L. P.[1]

iagoisrael1@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a publicação do trabalho seminal de Sir Michael Berry em 1984 (1), as fases geométricas tornaram-se grandezas bem populares em física teórica. Enquanto a maioria dos não especialistas depara-se com esse tema apenas ao estudar em livros-texto a evolução cíclica e adiabática de um Hamiltoniano dependente do tempo, na verdade a fase de Berry é relevante para a compreensão de temas tão diversos quanto os efeitos Hall quânticos, teorias topológicas de bandas e para a proposta de computação quântica holonômica. Esses desenvolvimentos posteriores a (1), tanto em aplicações quanto em princípios teóricos, deixaram claro que fases geométricas poderiam ocorrer em evoluções adiabáticas não cíclicas, em evoluções não adiabáticas ou mesmo apresentar caráter não Abeliano, por exemplo. Além disso, percebeu-se a posteriori que diversas manifestações de fases geométricas já haviam sido descobertas anteriormente a (1), como no efeito Aharonov-Bohm e em óptica de polarização, e que elas também em problemas puramente geométricos ou de física clássica. Entretanto, a complexidade das ferramentas matemáticas necessárias para uma compreensão profunda das fases geométricas faz com que muitos pesquisadores focados nas aplicações incorporem essas grandezas em seus cálculos via procedimentos *ad hoc*, sem realmente entenderem as diferenças entre os diferentes casos. De fato, pouco após a introdução do conceito por M. Berry, Barry Simon percebeu (2) que, genericamente, uma fase geométrica pode ser interpretada como uma holonomia de um fibrado em uma variedade e que o potencial de calibre pertinente pode ser visto como uma conexão nesse fibrado. O objetivo deste trabalho é o estudo das técnicas de geometria diferencial (transporte paralelo, conexões, fibrados) que permitam a caracterização das diferentes holonomias de sistemas físicos de forma sistemática. A abordagem consiste na busca por uma sólida compreensão dos conceitos matemáticos relevantes, mas guiada por associações diretas com fenômenos físicos. (3)

Palavras-chave: Fase de Berry. Fase geométrica. Holonomia. Geometria diferencial.

Referências:

1 BERRY, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. **Proceedings of the Royal Society of London A**: mathematical, physical and engineering sciences, v. 392, n. 1802, p. 45-57,1984.

2 SIMON, B. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and Berry's phase. **Physical Review Letters**, v. 51, n. 24, p. 2167-2170,1983.

3 GARRITY, T. A. **Electricity and magnetism for mathematicians**: a guided path from Maxwell's equations to Yang-Mills. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2015.

PG75

Photo-oxidation of bacterial lipid monolayers interacting with methylene blue and curcumin

JOCHELAVICIUS, K.[1]; NOBRE, T. M.[1]; AOKI, P. H. B.[2]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de[1]

karen.jochelavicius@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Faculdade de Ciências e Letras de Assis - UNESP

The emergence of bacterial resistance to multiple antibiotics has increased recently, and the development of new therapies is needed. Photodynamic inactivation (PDI), or antimicrobial photodynamic therapy (PDT), is a new strategy related to the treatment of bacterial infections based on the accumulation of a photosensitizer in microbial cell walls or membranes. Although not yet observed, it remains unclear if the microorganism is able to develop resistance to the therapy. The great advantage arises from the fact that it is site specific. Its principle of action relies on the production of oxidative stress, where a photosensitizer (PS) molecule transfers energy provided by light, in a specific wavelength, to molecular oxygen. This generates reactive oxygen species (ROS), which immediately reacts with nearby molecules. Unsaturated lipids, present in the cellular membrane, are susceptible to the attack of ROS. Finally, the subsequent damage to the membrane is believed to be the cause of cell death. (2) There are already many studies probing the efficacy of these therapies *in vivo* and *in vitro* (1); however, as far as we are concerned, there are no *in situ* studies about the PDT action in a bacterial membrane model. Here, we show a preliminary study on the interaction of methylene blue (MB) and curcumin (CUR) with an *Escherichia coli* mimetic membrane model, named lipid monolayer. Initially, we carried measurements with *E. coli* total lipid extract, under 5 different conditions: in the absence of light, in a pure PBS subphase, or with 0.5 μmol/L of either MB or CUR; and under light irradiation, in a subphase containing 0.5 μmol/L of either MB or CUR, using a red or a blue LED, respectively. The addition of both PSs increased the mean molecular area of the lipid film, indicating their incorporation. Besides that, the variation of area as function of time, under 30 mN/m of surface pressure, was recorded. The irradiated films showed a significant increase in stability, which might be related to the formation of hydroperoxide groups. We also conducted a brief study with confocal microscopy. A Langmuir-Blodgett (LB) film, containing the *E. coli* lipid film onto a solid substrate, was put in contact with a curcumin solution, and visualized. It was possible to observe a rapid fluorescence recovery after photobleaching (FRAP), and also an increased fluorescence intensity after the first photobleaching taken. One might conclude, from this simple experiment, that the interaction between curcumin and lipid is weak, and, somehow, the photo-degradation created more room to allocate curcumin molecules. It corroborates with the hydroperoxide groups formation, increasing the mean molecular area of the film. To better understand the interaction between lipid and PS, as well as its action when photo-activated, we started to work with isolated lipids.

Palavras-chave: Photodynamic therapy. Photodynamic inactivation. Lipid monolayers.

Referências:

1 DAI, T.; HUANG, Y.-Y.; HAMBLIN, M. R. Photodynamic therapy for localized infections: state of the art. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 6, n. 3-4, p. 170-188, 2009.

2 RISKE, K. A. et al. Giant vesicles under oxidative stress induced by a membrane-anchored photosensitizer. **Biophysical Journal**, v. 97, n. 5, p. 1362-1370, 2009.

PG76

Nebulização como ferramenta de entrega do fotossensibilizador na inativação fotodinâmica aplicada às doenças respiratórias

KASSAB, G.[1]; GERALDE, M. C.[1]; INADA, N. M.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

giulia.kassab@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Diante do constante aumento da resistência de bactérias a antibioticoterapia tradicional, surge a necessidade de se desenvolver métodos alternativos no tratamento de infecções. Uma possibilidade é a inativação fotodinâmica, que se baseia na utilização de um fotossensibilizador que se acumule preferencialmente nos patógenos e que seja ativado pela administração de luz em um comprimento de onda adequado, gerando espécies reativas que são tóxicas para o alvo. O potencial da inativação fotodinâmica no tratamento da pneumonia bacteriana em modelo animal foi demonstrado por este grupo de pesquisa (1), porém o sucesso da técnica depende da escolha de um método de entrega que seja capaz de levar as moléculas aos pulmões também em humanos. Dessa forma, este trabalho se propõe a avaliar a viabilidade da nebulização como método de entrega do fotossensibilizador na inativação fotodinâmica aplicada ao tratamento da pneumonia. Os nebulizadores são equipamentos utilizados para entregar medicamentos às vias respiratórias de forma local, limitando efeitos adversos e aumentando a eficácia dos tratamentos. Foram utilizados um nebulizador a jato de ar disponível comercialmente, e os fotossensibilizadores indocianina verde, Photodithazine® e Photogem®. Inicialmente, o estudo avaliou a velocidade e a porcentagem de nebulização dos compostos pelo equipamento, e verificou que todos os compostos eram estáveis durante o processo. A indocianina verde foi eleita como o composto mais promissor por conta da sua ativação por luz infravermelha, que pode ser administrada extracorporeamente em modelo animal. Então, foram desenvolvidos estudos *in vivo* para determinar a captação e distribuição da indocianina nebulizada pelos pulmões, e a toxicidade do tratamento na ausência de infecção. A nebulização se mostrou adequada para a entrega de indocianina verde aos pulmões no modelo animal.

Palavras-chave: Fotossensibilizadores. Nebulização. Inativação fotodinâmica.

Referências:

1 GERALDE, M. C. A promising in vivo protocol for non-invasive pneumonia treatment. **Photodiganostics and Photodynamic Therapy**, v. 12, n. 3, p. 336, Sept. 2015.

PG77

Descoberta e desenvolvimento de um ativo cosmético para controle da oleosidade

KATEKAWA, E.[1]; GUIDO, R. V. C.[1]

katekawa@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A acne é uma doença bastante comum e que atinge indivíduos de todas as idades e etnias. De acordo com o último estudo conduzido pela Organização Mundial da Saúde em 2010, quase uma em cada dez pessoas no mundo sofre de acne, sendo uma das dez doenças mais prevalentes. (1) Em 2016, o mercado global para tratamento de acne ficou próximo a US$ 5 bilhões e a estimativa é que ultrapasse US$ 7 bilhões em 2025. (2) Os tratamentos atuais mais eficazes contra a acne envolvem a diferenciação da glândula sebácea, com consequente diminuição da produção de sebo. Entretanto, tais substâncias podem levar a diversos efeitos adversos, enquanto outras soluções disponibilizadas no mercado não possuem a eficácia necessária. Neste projeto de pesquisa, buscamos agentes capazes de regular a produção de sebo utilizando técnicas de modelagem por homologia e triagem virtual baseada em estrutura. As informações estruturais obtidas do receptor modelado sugerem a presença de disjuntores moleculares análogos aos encontrados em alguns receptores acoplados à proteína G. (3)

Palavras-chave: Sebo. GPCR. Modelagem por homologia. Triagem virtual.

Referências:

1 HAY, R. et al. The global burden of skin disease in 2010: an analysis of the prevalence and impact of skin conditions. **Journal of Investigative Dermatology**, v. 134, n.6, p.1527-1534, 2014.

2 PERSISTENCE MARKET RESEARCH. **Global market study on acne treatment:** inflammatory acne segment anticipated toaAccount for 195 BPS gain in market revenue share during 2017 – 2025. Disponivel em: <http://www.prnewswire.com/news-releases/global-market-study-on-acne-treatment-inflammatory-acne-segment-anticipated-to-account-for-195-bps-gain-in-market-revenue-share-during-2017-2025-300485375.html>. Acesso em: 29 ago. 2017.

3 TRZASKOWSKI, B. et al. Action of molecular switches in GPCRs – theoretical and experimental studies. **Current Medicinal Chemistry**, v. 19, n.8, p. 090-1109, 2012.

PG78

LIBS em solos: quantificação elementar e estudo da influência do comprimento de onda

KRÜGER, A. L.[1]; NICOLODELLI, G.[2]; MILORI, D. M. B. P.[2]

annelk1@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] EMBRAPA

O uso de técnicas espectroscópicas na análise do solo é uma das aplicações com grande potencial na agroindústria, contudo, até os dias atuais são raras as técnicas implementadas de forma cotidiana no Brasil. Isto deve-se, principalmente, à enorme dificuldade em se ter equipamentos disponíveis para estes fins diretamente no local onde a amostra está presente, e em se ter uma técnica de fácil manuseio e implementação, assim como de alta confiabilidade. (1-3) Neste ponto a técnica espectroscópica LIBS destaca-se, devido a diferença de muitas outras técnicas para se quantificar a presença de elementos no solo, possui a grande vantagem de ser uma técnica de fácil implementação e alta versatilidade, permitindo o seu uso com pouca preparação das amostras e com uma rápida obtenção de resultados, assim como a sua portabilidade em equipamentos compactos. Portanto, na procura de uma agricultura sustentável e um adequado monitoramento ambiental, esta técnica esta sendo aplicada para auxiliar no controle e desenvolvimento do agronegócio. Uma das dificuldades a se enfrentar na análise quantitativa de amostras de solo é que elas apresentam uma complexa constituição, que varia geograficamente e de acordo com o manejo. Os sistemas LIBS comerciais são ferramentas viáveis para quantificação de elementos e seu desempenho pode se adequar para estudos elementar no solo. Sendo assim, neste trabalho descrevemos o estudo da quantificação de um elemento presente nas matrizes de solo (o potássio) por meio do LIBS. As amostras foram coletadas em uma região de mata Atlântica no interior sudeste de São Paulo. Um dos objetivos deste trabalho ´e comparar o desempenho, ao se quantificar primeiramente o potássio,de dois sistemas LIBS; um sendo um sistema de laboratório 'homemade' e o outro, sendo um sistema comercial portátil, para desenvolver curvas de calibração para os macro e micro nutrientes nestes sistemas LIBS de diferentes configurações, e assim avaliar o potencial da técnica nas aplicações agroindustriais. Também investigamos a influência de dois comprimentos de onda (532 nm e 1064 nm) para o desempenho da técnica no sistema de 'homemade' laboratório. Para estes fins, valores de referência são obtidos pelo método de espectroscopia de absorção atômica, método de alta confiabilidade para a análise de solo, e que foram correlacionados com valores da área dos picos do elemento mediante um ajuste estatístico linear, obtendo-se altos coeficientes de calibração, de 0.94, 0.95 e 0.84 para os casos dos sistemas de laboratório a 532 nm, 1064 nm, e o comercial a 1064 nm, respectivamente. Estes resultados mostram que apesar de ser menos acurada na quantificação do elemento na matriz de solo, o sistema comercial é ainda adequando para ser usado para estes fins. Além disso, vemos que para as medidas LIBS a 532 nm a confiabilidade nos resultados é maior. Tudo isso confirma a aplicabilidade da LIBS em um equipamento comercial na análise elementar do solo para fins agrícolas, abrindo-se assim novas possibilidades de melhoras no agronegócio.

Palavras-chave: Solo. LIBS. Espectroscopia.

Referências:

1 DIAZ, D.; HAHN, D. W.; MOLINA, A. Evaluation of laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) as a measurement technique for evaluation of total elemental concentration in soils. **Applied Spectroscopy**, v. 66, n. 1, p. 99-106, 2012.

2 NOLL, R. **Laser-induced breakdown spectroscopy**: fundamentals and applications. Heidelberg: Springer-Verlag, 2012.

3 MIZIOLEK, A. W.; PALLESCHI, V.; SCHECHTER, I. **Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS)**: fundamentals and applications. Cambridge: Cambridge University Press, 2006.

PG79

Estudo com espectroscopia de fluorescência induzida por laser e imagens de fluorescência no diagnóstico de doenças de soja

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

thiagomassaiti.k.k@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP [1]EMBRAPA Instrumentação - CNPDIA

Com uma grande diversidade climática, 13% de toda a água doce do mundo em seu território, abundância na energia solar e chuvas regulares, o Brasil é um país favorável para o desenvolvimento da agropecuária. (1) Segundo o Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento (MAPA) as vendas do setor de Agronegócio brasileiro, de janeiro até julho de 2016, alcançaram US$ 52,8 bilhões, respondendo por 49% de todas as exportações do país. (2) Um produto que contribuiu decisivamente para este sucesso foi a soja, onde o Brasil é o maior produtor. Porém um fator que pode comprometer o crescimento do setor de agronegócio são as pragas e doenças. Neste trabalho foi estudado folhas de soja sadias e doentes com Green Stem and Foliar Retention (GSFR), popularmente conhecida como Soja Louca II, utilizando Espectroscopia de Fluorescência Induzida por Laser (LIFS) e Imagens de Fluorescência, junto com modelos estatísticos de Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLSR). O sistema LIFS é composto por um laser de diodo, com emissão em 405 nm, um mini espectrômetro, um cabo óptico, filtros e um computador para tratamento dos espectros. Já o sistema de Imagens de Fluorescência é composto por um laser, com emissão em 377 nm, uma câmera, um conjunto de lentes e um porta amostra. (3) Desta forma, o classificador construído com os espectros retirados do sistema LIFS obteve 90% de acerto na classificação correta, entre folhas sadias e doentes, e o classificador criado com as imagens coletadas com o sistema de Imagens de Fluorescência atingiu 82% de acerto. Os resultados apresentados foram bastante satisfatórios, por se tratarem de folhas visualmente idênticas, e podendo as técnicas serem empregadas na construção de equipamentos para auxiliar o manejo da cultura.

Palavras-chave: Espectroscopia de Fluorescência Induzida por Laser . Imagens de fluorescência. Green stem and foliar retention. Soja louca II.

Referências:

1 PORTAL DO AGRONEGÓCIO. **Estudo sistemático da importância do setor do agronegócio brasileiro. 2004**. Disponível em: <http://www.portaldoagronegocio.com.br/pagina/o-que-e>. Acesso em: 17 out. 2014.

2 BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento (MAPA). Secretaria de Relações Internacionais do Agronegócio. **Balança comercial do agronegócio:** agosto / 2016. 2016. Disponível em: <http://www.agricultura.gov.br/comunicacao/noticias/2016/08/exportacoes-do-agronegocio-somam-uss-52-bilhoes-no-acumulado-do-ano>. Acesso em: 9 ago. 2016.

3 RANULFI, A. C. et al. Laser-induced fluorescence spectroscopy applied to early diagnosis of citrus

Huanglongbing. **Biosystems Engineering**, v. 144, p 133-144, 2016. doi: 10.1016/j. Biosystemseng. 2016.02.010.

PG80

Introdução à QCD na rede

LACHINI, N.[1]; MENDES, T. C. R.[1]

nelsonlachini@gmail.com

1 Instituto de Física de São Carlos - USP

O modelo padrão é, até hoje, a melhor tentativa de descrever três das quatro interações da natureza: a eletromagnética, a fraca e a forte. Neste modelo, a teoria que descreve as interações fortes chama-se cromodinâmica quântica (*quantum chromodynamics* ou QCD) e apresenta diversas características altamente não triviais que advêm essencialmente de sua estrutura matemática não abeliana. Na QCD, as partículas massivas são os quarks e os mediadores da interação são os glúons. Cálculos analíticos são possíveis, com certa dificuldade, no regime de altas energias (maiores que 1 GeV), em que os quarks interagem fracamente e a teoria de perturbação é satisfatória. Porém, o espectro de baixa energia da QCD, onde se encontra grande parte da matéria ligada que nos circunda (como prótons e nêutrons), ainda é uma grande incógnita. Por exemplo, o fenômeno de confinamento de cor, ou seja, o fato de não observarmos quarks livres, é um aspecto muito importante na descrição atual da natureza e ainda não possui uma prova rigorosa. A formulação de rede permite o estudo da QCD no regime não perturbativo de baixas energias a partir de primeiros princípios, utilizando métodos de mecânica estatística, como o método de Monte Carlo. Em particular, podem ser estudados aspectos de confinamento e o espectro hadrônico da QCD. Neste trabalho são apresentados os elementos teóricos necessários para as simulações e alguns resultados numéricos da teoria puramente gluônica (sem quarks dinâmicos), estes comparados à literatura (1), incluindo observáveis fundamentais e uma estimativa de outros mais complicados, como o potencial quark-antiquark estáticos.

Palavras-chave: Cromodinâmica quântica. Monte Carlo. Não perturbativo

Referências:

1 LUCINI, B.; TEPER, M. SU(N) gauge theories in four dimensions: exploring the approach to N = ∞. **Journal of High Energy Physics**, v. 2001, p. 050-1-050-36, June 2001. doi: 10.1088/1126-6708/2001/06/050.

PG81

New physics in astroparticle physics

LANG, R. G.[1]; SOUZA, V. de[1]

rodrigo.lang@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Astrophysics is a field that deals with the extremes of the Universe. Fundamental particles, the smallest known objects, are accelerated at the largest ones, such as supernovae, galaxies or even clusters of galaxies, and are detected on Earth in a wide range of energy, covering up to 11 decades and reaching energies much higher than those in terrestrial accelerators. Therefore, the understanding of the astrophysical questions, such as the acceleration and the propagation of these particles, can bring meaningful information not only on astrophysical objects, but also on basic physics, such as the interaction of fundamental particles or even new physics. In this work, two scenarios of new fundamental physics will be studied: Lorentz invariance violation (1) and dark matter. The first derives from high-energy models such as quantum gravity and can be studied using the propagation of energetic gamma-rays. The latter is a possibility to explain the excess of matter needed in some regions of Space, but not detected via electromagnetic interactions. Two state of the art experiments are used, the Pierre Auger Observatory (2), composed of 3660 water tanks and 27 fluorescence telescopes spread in a 3000 km^2 area, which aims to detect cosmic rays with the highest energies of about 10^{20} eV. And the Cherenkov Telescope Array (3), CTA, a new generation of Imaging Atmospheric Cherenkov Telescopes expected to have an order of magnitude more telescopes than the previous generation, which aims to detect gamma-rays with energy ranging from tens of GeV to hundreds of TeV. Using the upper limits on the GZK photon flux from Auger, limits on the Lorentz invariance violation in the photon sector have been imposed in this work. These limits are several orders of magnitude more restrictive than the usual limits imposed using other astrophysical scenarios. A new analysis for imposing limits using the data that will be measured by CTA is being developed at the moment.

Palavras-chave: LIV. Gamma-ray. Propagation.

Referências:

1 MATTINGLY, D. Modern tests of Lorentz invariance. **Living Reviews in Relativity**, v. 8, p. 1–78, 2005. doi: 10.12942/lrr-2005-5.

2 THE PIERRE AUGER COLLABORATION. The Pierre Auger Cosmic Ray Observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A**: accelerators, spectrometers, detectors and associated equipment, v. 798, p. 172–213, 2015. doi: 10.1016/j.nima.2015.06.058.

3 THE CTA CONSORTIUM. Introducing the CTA concept. **Astroparticle Physics**, v. 43, p. 3–18, 2013. doi: 10.1016/j.astropartphys.2013.01.007.

PG82

Evaluation of photodynamic therapy using redox-responsive nanoparticles carrying PpIX

LEITE, I. S.[1]; VIVERO-ESCOTO, J. L.[2]; LYLES, Z.[2]; BAGNATO, V. S.[1]; INADA, N. M.[1]

ilaiali.leite@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] University of North Carolina - UNC

The research of light's interaction with a photoactive substance to promote cellular death was initially introduced by Oscar Raab in the late 1800s. (1) Since then, this technique – photodynamic therapy (PDT) – has been proposed to treat a wide range of maladies, from infectious illnesses to noncommunicable diseases. Cancer, an assortment of related diseases, is among the leading causes of death worldwide and has been a central issue assessed by PDT research and clinical trials over the last 35 years. (2) Although it can be prescribed to treat precancerous lesions and some types of cancer, inefficient photosensitizer buildup at treatment site hampers PDT's efficacy. Nanotechnology has been addressing drug delivery problems by the development of distinct nanostructured platforms capable of increasing pharmacological properties of molecules, such as solubility and circulating half-life. (3) The association of nanotechnology's potential to enhance photosensitizer delivery to target tissues with PDT's oxidative damage to induce cell death has been rising as prospect to optimize cancer treatment. In this study, we aim to verify and compare the efficiency of PDT using redox-responsive silica-based nanoparticles carrying protoporphyrin IX (PpIX) in vitro, in both tumor and healthy cells. Four polysilsesquioxane-PpIX nanoparticles were studied: one composed of silica and PpIX (Ctrl-PpIX-SiNps), a nanoparticle similar to the previous system containing a redox-responsive linker that can be broken under reducing environments usually found in cancer cells (RR-PpIX- SiNps), a RR-PpIX- SiNps functionalized with polyethylene glycol (PEG, PEG-RR- PpIX-SiNps) and PEG-RR- PpIX functionalized with folic acid (FA-PEG-RR-PpIX-SiNps), to improve the nanoparticle's targeting property for in vivo applications. Cytotoxicity was evaluated in healthy (human fibroblasts – HDFn cell line - and keratinocytes - HaCaT) and tumor cells (MCF-7 – human mammary carcinoma, B16-F10 – murine skin melanoma and A431 – human skin non-melanoma). Dose-response experiments revealed the higher susceptibility of B16-F10 cell line to PDT (630 nm, 50 J/cm^2) than HDFn cells: when incubated for 24 h with 50 μg/mL of nanoparticles, the viability of B16-F10 cells was reduced to approximately 20 %, while similar results were obtained in HDFn cultures when solutions over 150 μg/mL were used. The comparison of PDT effectiveness between nanostructured PpIX and free PpIX revealed that, when exposed to RR-PpIX- SiNPs, MCF-7 and A431 cells were more prone to PDT cytotoxic effects (70 % of cell death) than the HaCaT cell line (less than 30 % of cell death). Free PpIX, however, displayed high phototoxicity for MCF-7, A431 and HaCaT cells, inducing more than 90 % of cellular death in both cell lines. Further assays will evaluate differences in nanoparticles and free PpIX uptake, distribution kinetics and the quantification of reactive oxygen species, mitochondrial membrane potential, apoptosis and necrosis rates and in vivo analysis such as nanoparticles distribution and PDT's efficacy.

Palavras-chave: Photodynamic therapy. Protoporphyrin IX. Nanotechnology.

Referências:

1 ABDEL-KADER, M. H. The journey of PDT throughout history: PDT from pharos to present. In: KOSTRON, H.; HASAN, T. (Ed.). **Photodynamic medicine**: from bench to clinic. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2016. cap. 1, p. 1-21.

2 BROWN, S. B.; BROWN, E. A.; WALKER, I. The present and future role of photodynamic therapy in cancer treatment. **Lancet Oncology**, v. 5, n. 8, p. 497-508, 2004.

3 SHI, J. et al. Nanotechnology in drug delivery and tissue engineering: from discovery to applications **Nano Letters**, v. 10, n. 9, p. 3223-3230, 2010.

PG83

Novo empacotamento nos coiled-coil das septinas do grupo III e a sua relação com a polimerização de filamentos em redes

LEONARDO, D. A.[1]; NASCIMENTO, A. F.[2]; VALADARES, N. F.[3]; USON, I.[4]; GARRATT, R. C.[1]

dleonardo@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - CNPEM

[3] Departamento de Biologia Celular - UNB

[4] Instituto de Biologia Molecular de Barcelona - IBMB

Septinas forman heterofilamentos usando dois tipos de interfaces (G e NC) como observado na estrutura do heterotrímero SEPT2-SEPT6-SEPT7. O domínio C-terminal, na interface NC, apresenta uma região que pode formar um coiled-coil homotípico (entre septinas do grupo III) ou heterotípico (entre septinas do grupo II e IV). Embora se presuma que estes coiled-coils sejam responsaveis pela estabilidade da formaçao dos filamentos e sua subsequente polimerização em redes, os mecanismos exatos que controlam estas funções ainda não são entendidos. (1-2) Aqui apresentamos a estrutura e estudos biofísicos do coiled-coil heterotipico da SEPT1, SEPT4 e SEPT5. As estruturas cristalográficas da SEPT1 e SEPT4 mostram coiled-coils diméricos e paralelos com sete repetições (abcdefg) onde os aminoacidos nas posições "a" são polares e nas posições "d" são hidrofóbicos, formando um nucleo com um lado hidrofílico e outro hidrofóbico (um novo empacotamento para coiled-coils). Este empacotamento único mostra uma rede de interações hidrofóbicas estabilizando um lado da interface enquanto o outro lado é estabilizado por uma rede de interações eletrostaticas. A estrutura da SEPT5 mostra um coiled-coil dimérico e antiparalelo, com a repetição (abcdefg) com aminoácidos hidrofóbicos nas posições "a" e "d" (como um coiled-coil clásico). Os resultados biofísicos mostram que o estado oligomérico dos coiled-coil muda em função do pH. Enquanto em pH 5.8 eles são preferencialmente dímeros, em pH 8.0 se formam tetrámeros; a estabilidade deles não é alterada pelas mudanças do pH. Estes resultados mostram importantes descobertas tanto nas estudos estruturais de coiled-coils (com um novo empacotamento) quanto na área das septinas, propondo que os dominios C-termais das septinas do grupo III possuem a habilidade para formar coiled-coils paralelos/antiparalelos (permitindo a polimerização de filamentos de septinas em redes).

Palavras-chave: Septinas. Coiled-coil. Estrutura proteína.

Referências:

1 SALA, F. A. et al. Heterotypic coiled-coil formation is essential for the correct assembly of the septin heterofilament. **Biophysical Journal**, v. 111, n. 12, p. 2608-2619, 2016.

2 MARQUES, I. A. et al. Septin c-terminal domain interactions: implications for filament stability and assembly. **Cell Biochemistry and Biophysics**, v. 62, n. 2, p. 317-328, 2012.

PG84

Estudo funcional e estrutural das proteínas spliceossomais U5-15K e U5-102K de Trypanosoma brucei

LIMA, A. L. de[1]; SILVA, M. T. A. da[1]; THIEMANN, O. H.[1]

laura.ana.lima@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Tripanossomatídeos possuem processos únicos e conservados de regulação da expressão gênica, como a transcrição policistrônica, o envolvimento da RNA polimerase I na síntese de RNA mensageiro (mRNA) e maturação do pré-mRNA a partir do trans-splicing. Nesse contexto o T. brucei pode ser considerado um organismo modelo e o estudo do processamento de RNA pode ser extrapolado para outros parasitos da mesma família. Na reação de splicing, as regiões não codificantes (íntrons) são excisadas e as regiões codificantes (éxons) ligadas para formar o mRNA maduro. Tanto o cis quanto o trans-splicing ocorrem por meio de duas reações de transesterificação catalisadas pelo spliceossomo, um complexo formado por cinco ribonucleoproteínas (small nuclear ribonucleoproteins, snRNPs) U1, U2, U4/U6 e U5, cuja composição e conformação durante o processamento do mRNA são altamente dinâmicas. Embora bem definidas em mamíferos e levedura, as ribonucleoproteínas e a função dos fatores de splicing não são bem entendidos em tripanossomatídeos. A U5-102K é importante para a formação de um complexo chamado U4/U6.U5 tri-snRNP (1), enquanto que a estrutura do U4/U6.U5 tri-snRNP de levedura, resolvidas recentemente por crio microscopia eletrônica, mostram que a Dib1(U5-15K) tem uma localização central no complexo, associando-se ao U5 snRNA, ao pré-mRNA, à proteína Prp31 e ao domínio N-terminal da Prp8. (2) Também foi visto que tanto Dib1 quanto Prp8 estão associadas com a estabilização do hairpin formado pela parte do U6 snRNA (ACAGAGA). (3) Com isso em vista, esse trabalho tem por objetivo o estudo do trans-splicing em T. brucei, mais especificamente o estudo estrutural do subcomplexo formados pelas proteínas específicas da partícula U5 snRNP, U5-15K e U5-102K, bem como o estudo da função da atividade de autoclivagem, apresentada pela U5-15K, in vivo. Foram feitas mutações sitio dirigidas na proteína U5-15k, visando a redução de suas regiões flexíveis, U5-15k truncada, e inibição da atividade de autoclivagem, U5-15KC66A, U5-15KS109A, U5-15KS126A e U5-15KS133. Também foi feita a clonagem da U5-15K e U5-102K em pET duet e pc-PTP-neo para o estudo do subcomplexo formado por essas proteínas. As proteínas U5-15KC66A, U5-15KS109A, U5-15KS126A e U5-15KS133 foram expressas em Bl21 (DE3), foi feita a purificação por afinidade e a avaliação do enovelamento por Fluorimetria Diferencial de Varredura da U5-15kC66A e testes de clivagem, que mostraram que a cisteína 66 não tem envolvimento nessa atividade. Esses testes ainda devem ser repetidos com as mutantes U5-15KS109A, U5-15KS126A e U5-15KS133. Já a U5-15K truncada foi expressa em Bl21 (DE3), foi feita a purificação por afinidade e a avaliação do enovelamento por Dicroísmo Circular e Fluorimetria Diferencial de Varredura e ensaios de cristalização, que não resultaram em cristais, novos ensaios variando a concentração de proteína e kits comerciais ainda serão realizados. Quanto ao estudo do subcomplexo 15K-102K, ainda é necessário realizar testes de expressão e as proteínas purificadas usando a técnica de PTP-tag ainda devem ser realizadas por espectrometria de massas.

Palavras-chave: Trans-splicing. DimI. Prp6.

Referências:

1 SILVA, M. T. A. et al. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 106, n. 2, p. 130-138, 2011.

2 WAN, R. et al. The 3.8 Å structure of the U4/U6.U5 tri-snRNP: insights into spliceosome assembly and catalysis. **Science**, v. 351, n. 6272, p. 466-475, 2016.

3 NGUYEN, T. H. D. et al. Cryo-EM structure of the yeast U4/U6.U5 tri-snRNP at 3.7 Å resolution. **Nature.** v. 530, n. 7590, p. 298-302, 2016.

PG85

Control of non-Markovianity by the dissipation of a qubit

LIMA, R. B. B.[1]; SOARES-PINTO, D. de O.[1]; BRITO, F. B. de[1]; DEAZEVEDO, E. R.[1]; FILGUEIRAS, J.[1]

rafael.bruno.lima@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The non-Markovian nature of quantum systems recently turned to be a key subject for investigations on open quantum system dynamics. In this work we study how to control the non-Markovianity in a two-level system through the spin-lattice relaxation rate of an ancillary qubit, acting as the environment. Finally, we give an experimental demonstration of this toy model using liquid state nuclear magnetic resonance. (1-3)

Palavras-chave: Open quantum systems. Non-Markovianity. Nuclear magnetic resonance.

Referências:

1 MICHAEL, N. A,; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

2 KONDO, Y. et al. Using the quantum Zeno effect for suppression of decoherence. **New Journal of Physics**, v.18, p.013033, 2016.doi:10.1088/1367-2630/18/1/013033.

3 SLICHTER, C. P. **Principles of magnetic resonance**. Berlin: Springer Verlag, 2013.

PG86

Optoelectronic properties of an organic light harvesting capacitor

LIMA FILHO, J. B. de[1]; MIRANDA, P. B.[1]

joaquimbrasil@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work, a new architecture for organic photovoltaic devices is investigated. Proposed by Lanzani and his team (1), it is known as the Light Harvesting Capacitor (LHC) and it differs from the usual ones because its photogenerated charges drive the external potential without the need of being collected. The charges are stored in nano-dipoles within the dielectric layer when the device is illuminated. With this feature, the LHC is expected to present advantage over the usual photovoltaic devices which have their efficiency limited by charge transport issues. Following the worldwide interest on practical organic devices, in this work the LHC was fabricated by the Layer-by-Layer self-assembly technique. The polymers poly(allylamine hydrochloride) and poly(sodim 4-styrenesulfonate) were used as insulating bilayers, the polymer poly [3-(sodium-6 hexanoate) thiohphene-2, 5-diyl] as electron donor and the organic molecule N,N'-bis(6-aminohexyl)-3,4,9,10-perylenediimide as electron acceptor. Preliminary results are presented for multistack LHCs that were fabricated with up to 50 active bilayers sandwiched by insulating bilayers. LbL assembly led to very thin films with average thickness of about 1.5 micrometer. Optical and electronic characterizations with UV-Vis spectroscopy, continuous wave photoinduced absorption spectroscopy, impedance spectroscopy, and photocurrent showed that the LHC works, but presents low efficiency. Investigation of what causes such low efficiency is in progress in this research project.

Palavras-chave: Organic electronics. Light harvesting capacitor. Photovoltaic.

Referências:

1 GARBUGLI, M. et al. Light energy harvesting with nano-dipoles. **Nanoscale**, v. 4, n. 5, p. 1728-1733, 2012.

PG87

Investigating the Endocytosis of gold nanorods and natural nanocarriers

LINS, P.[1]; CANCINO-BERNARDI, J.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]

ppincela@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Adverse biological effects are a great concern in the development of new nanomaterials. To engineer safer nanomaterials, it is important to evaluate the intracellular fates, such as endocytosis and exocytosis. Properties such as shape, charge and functionalization of nanoparticles induce different endocytosis pathways. (1) The goal of the project is to evaluate endocytosis of gold nanorods functionalized with poly (ethylene glycol) (PEG), using three cell lines FC3H, HTC and RAW264.7. It is known that the use of PEG-functionalized nanomaterials for long periods can induce immune response. (2) Therefore, the use of nanocarriers has been an alternative to the use of PEGlated nanoparticles. The exosomes have become prominent, since they are nanoparticles naturally produced by the cells. For this reason, it is important to investigate how these natural nanocarriers internalize in cells, and to evaluate their use in delivery. This project will also investigate the endocytosis of HTC extracted exosomes. (3) For this purpose, we will use the pharmacological inhibitors amiloride, nocodazole, nystatin and hydroxyl-dinasore. For clathrin-dependent endocytosis inhibition, the potassium depletion method will be used. Gold nanorods were successfully synthesized and exhibited the longitudinal band near infrared. The NRs were functionalized with PEG resulting in a zeta potential of 5.29 mV. Additionally, HTC exosomes were extracted using serial ultracentrifugation. Dynamic light scattering analyses showed that the exosomes have a size of 100 nm with PdI of 0.5. MTT studies in HTC cells with inhibitors showed no cytotoxicity. Our studies may contribute to the understanding of nanomaterials toxicity a well as to contribute to the development of nanomedicine.

Palavras-chave: Nanorods. Exosomes. Endocytosis. Nanotoxicology

Referências:

1 IVERSEN, T-G.; SKOTLAND, T.; SANDVIG, K. Endocytosis and intracellular transport of nanoparticles: Present knowledge and need for future studies. **Nano Today**, v. 6, n. 2, p.176-185, 2011.

2 ISHIDA, T.; KIWADA, H. Accelerated blood clearance (ABC) phenomenon upon repeated injection of PEGylated liposomes. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 354, n. 1-2, p. 56-62, 2008.

3 MELO, S. A. et al. Glypican-1 identifies cancer exosomes and detects early pancreatic cancer **Nature**, v. 523, n. 7559, p. 177-182, 2015.

PG88

Modelo modificado de Skyrme

LIVRAMENTO, L. R.[1]; FERREIRA, L. A.[1]

leandrorozalivramento@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O modelo modificado de Skyrme proposto em (1) tem um setor auto-dual onde a invariância da carga topológica junto com as equações de auto dualidade garantem que a solução estacionária para os campos independentes g e h_{ab} é solução de menor energia da equação de Euler-Lagrange. As equações de auto-dualidade podem ser usadas para determinar g através de h_{ab} ou vice versa. Definindo uma matriz $M_{ab} \equiv R_i^a R_i^b$ determinada inteiramente em termos de g, mostramos que qualquer mapa regular $g : S^3 \to SU(2)$ que torne a matriz M inversível satisfaz automaticamente as equações de auto-dualidade e determina h_{ab}. Em particular, o ansatz holomórfico $u = u(w), u^* = u^*(w^*), \chi = \chi(r)$ diagonaliza M e se pode construir soluções de carga n através do ansatz racional $u(w) = \frac{p(w)}{q(w)}$ onde n é o maior grau entre os polinômios $p(w)$ e $q(w)$.

Palavras-chave: Modelo de Skyrme. Auto dualidade.

Referências:

1 FERREIRA, L. A. Exact self-duality in a modified Skyrme model. **Journal of High Energy Physics**, v. 2017, n. 7, p. 039-1-039-12, 2017.

PG89

Descrição cristaloquímica e mineralógica de minerais do grupo da romeíta

LOPES, G. A. de C.[1]; ANDRADE, M. B. de[1]; ATENCIO, D.[2]; ELLENA, J. A.[1]

g.anderson@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Geociências - USP

Recentemente têm-se intensificado as pesquisas sobre os minerais do supergrupo do pirocloro, que inclui o grupo da romeíta, principalmente após sua reformulação da classificação e nomenclatura, que também discutiu possíveis novas espécies a serem localizadas e descritas (1). O grupo da romeíta possui apenas 7 espécies aprovadas e que possuem caracterização completa, sendo assim bastante provável a obtenção de novas espécies. Para algumas já aprovadas, ainda, faltam maiores informações para descrição completa e novas ocorrências. O grupo da romeíta pertence ao supergrupo do pirocloro, que possui fórmula geral $A_2B_2X_6Y$, e cristaliza no sistema cúbico, em grupos espaciais Fd-3m e $P4_332$ (2). O grupo da romeíta se distingue dos demais dentro do supergrupo pela predominância de Sb na posição cristalográfica B contendo quantidades variadas de cátions dos elementos Ca, Na, Ba, K, Fe, Mg, Mn, Terras Raras, Sr, Nb, Ta, Ti, K e Ti. A romeíta também é uma fonte de Sb, que é usado na produção de ligas metálicas e na indústria cosmética. Foram obtidas quatro amostras de romeítas, codificadas como MC1-MC4, das localidades de Janchev, Kalugeri Hill (Macedônia), Praborna, Saint-Marcel (Itália), Torino, Piemonte (Itália) e foram realizadas análises químicas por microssonda eletrônica no modo WDS, e as fórmulas químicas ideais das amostras analisadas foram, por exemplo, as seguintes: MC1: $Ca_2Sb_2O_6F$ e MC2: $Ca_2Sb_2O_6(OH)$. Deste modo as amostras MC1 e MC2 são uma fluorcalcioromeíta e uma hidroxicalcioromeíta, respectivamente. A presença de água na amostras foi avaliada utilizando espectroscopia Raman nas regiões de espectro característico de H_2O estrutural e OH^-. As estruturas cristalinas da amostras de romeíta foram resolvidas através de difração de raios-X de monocristal e os refinamentos executados com o programa SHELXL, os quais obtiveram valores na ordem de R1=1,4% e GooF=1,16. Para discutir a presença de OH^- e F^- nas amostras, realizou-se o cálculo do bond-valence (3) a partir dos dados do refinamento. Por fim os minerais associados foram investigados por meio de espectroscopia Raman e MEV-EDS, e alguns dos minerais associados identificados foram dolomita, rodocrosita, quartzo, hematita, albita, barita e piroxeno.

Palavras-chave: Romeíta. Cristalografia. Difração de monocristal. RAMAN. Microssonda eletrônica.

Referências:

1 ATENCIO, D., et al. The pyrochlore supergroup of minerals: nomenclature. **Canadian Mineralogis**t, v. 48, n.3, p.73-698,2010.

2 ANDRADE, M. B., et al. Hydroxycalciomicrolite, $Ca_{1.5}Ta_2O_6(OH)$, a new member of the microlite

group from volta grande pegmatite. **Journal of Solid State Chemistry,** v.183, n.4, p.890-8944.2010.

3 BROWN, I. D. Recent develops in the methods and applications of the bond valence model. **Chemistry Review**,v.109, n.12, p.6858-6919,2009.

PG90

Medição da razão 2H/1H de fluxo em raios cósmicos com o experimento AMS-02.

LORDELLO, V. D.[1]; VECCHI, M.[1]

imeieu@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Raios Cósmicos são partículas carregadas e altamente energéticas que chegam à Terra do espaço. (1) Os mecanismos de produção, aceleração e propagação dessas partículas não são completamente conhecidos e o estudo do fluxo e da composição dos raios cósmicos ajudam a esclarecê-los. O AMS-02 (Alpha Magnetic Spectrometer) é um detector de partículas instalado na ISS (International Space Station) que realiza medidas redundantes de várias de suas propriedades. Acredita-se que o deutério (2H) nos raios cósmicos se origina principalmente de interações de partículas energéticas de próton e hélio com o meio inter-estrelar galático, e portanto o fluxo desse isótopo pode ser usado para restringir parâmetros em modelos de propagação de raios cósmicos. (2) Esse trabalho apresenta uma medição do fluxo de deutério nos raios cósmicos numa região ainda inexplorada de energia, de 0.7 GeV a 7 GeV de energia cinética por nucleon.

Palavras-chave: Física de astropartículas. AMS-02. Medida de deutério nos raios cómicos.

Referências:

1 LONGAIR, M. S. **High energy astrophysics**. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. 880 p.

2 TOMASSETTI, N.; FENG, J. The curious case of high-energy deuterons in Galactic cosmic rays. **Astrophysical Journal**, v. 835, n. 2, p. L26-1-L26-5, 2017.

PG91

A non-linear approach for pattern recognition in networks

MACHICAO, J.[1]; BRUNO, O. M.[1]

mj.machicao@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos -USP

The combination of pattern recognition and networks emerges as an important approach to the high demand for methods that handle in a big data scenario. Thus, pattern recognition in networks aims to characterize networks by extracting information from the correlation between vertices and their relationship to the network topology. While studies have tended to focus on structural measurements, which are commonly used for the characterization of networks (1), recently, there have been some attempts to use non-linear methods, such as random walks. (2) Thus, we proposed a cellular automata model that embeds its dynamics over a network topology aiming to produce their intrinsic spatio-temporal patterns from them. Inspired by the rules of an artificial life model, here we introduce the life-like network automata (LLNA) (3) as a tool for network analysis in the context of pattern recognition applications. The LLNA method performances was explored into four classification tasks that use networks as data representation for pattern recognition purposes: (i) to infer the authorship of disputed documents in multiple contexts; (ii) identifying organisms from distinct domains of life, *Archaea*, *Bacteria* and *Eukaryota*, through their metabolic networks; (iii) identifying structural patterns in two online social networks, Twitter and Google+, and, finally, (iv) classifying stomata distribution patterns varying according to different lighting conditions. The proposed method has made significant progress in real-world pattern recognition applications from a wide branch of fields.

Palavras-chave: Complex systems. Network-automata. Pattern recognition.

Referências:

1 COSTA, L. F. et al. A pattern recognition approach to complex networks. **Journal of Statistical Mechanics**: theory and experiment, v. 2010, p.1015-1-11015-24, 2010. doi: 10.1088/1742-5468/2010/11/P11015.

2 GONÇALVES, W. N.; MARTINEZ, A. S.; BRUNO, O. M. Complex network classification using partially self-avoiding deterministic walks. **Chaos**, v. 22, n. 3, p. 033139-1-033139-13 , 2012.

3 MIRANDA, G. H. B.; MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Exploring spatio-temporal dynamics of cellular automata for pattern recognition in networks. **Scientific Reports**, v. 6, p. 37329-1-37329-15, 2016. doi: 10.1038/srep37329.

PG92

Planejamento de novos moduladores da proteína tubulina com propriedades antitumorais in vitro

MAGALHÃES, L. G.[1]; FONSECA, M. B. da[2]; GRAEBIN, C. S.[2]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

luma.magalhaes@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Exatas - UFRJ

O câncer constitui um conjunto de mais de cem doenças caracterizadas pelo crescimento descontrolado de células atípicas capazes de invadir e se disseminar por diversos tecidos e órgãos. É considerado um problema de saúde mundial, sendo uma das maiores causas de morte todos os anos. Dados da Organização Mundial da Saúde (OMS) indicam que 18% das mortes no mundo serão causadas por câncer em 2030. No Brasil, o Instituto Nacional do Câncer (INCA) estima 596 mil novos casos da doença para 2017. Apesar de vasta quimioterapia disponível, os tratamentos são complexos e apresentam problemas como alta toxicidade, resistência e baixa eficácia. (1) Nesse contexto, o presente trabalho de doutorado visa à identificação, planejamento e otimização de novas moléculas com atividade antitumoral. As investigações foram conduzidas considerando-se três alvos biológicos. O primeiro foi (i) a proteína tubulina, um alvo anticâncer amplamente validado e que está diretamente relacionado aos dois alvos fenotípicos estudados: (ii) a migração celular, característica relacionada ao processo de metástase, que é responsável por 90% das mortes por câncer; e (ii) a angiogênese, processo de neovascularização responsável pela nutrição da massa tumoral. (2) Para tanto, foram empregados métodos de planejamento de fármacos baseado na estrutura do receptor (SBDD, sigla inglesa para *structure-based drug design*), que fazem uso de estruturas cristalográficas da proteína tubulina disponíveis no PDB (*Protein Data Bank*) para a identificação e otimização de ligantes. As modificações moleculares foram feitas a partir de uma série inicial de acridinonas, caracterizada em trabalhos anteriores do grupo. (3) Os análogos foram investigados para o desenvolvimento de relações entre a estrutura e atividade (SAR, sigla inglesa para *structure-activity relationships*) e otimização de propriedades biológicas e físico-químicas. Como resultado, um conjunto de acridinonas bioativas, apresentando citotoxicidade seletiva contra a linhagem tumoral MDA-MB-231, foi identificado. Os compostos inibiram a migração celular com valores de IC_{50} entre 0,3 e 1,7 μM, inibiram a polimerização de tubulina com valores de IC_{50} entre 0,9 e 24 μM e a tubulogênese *in vitro.* Foi avaliada também a interação dos compostos com a glicoproteína-P (Pgp), que é responsável pela resistência a diversos tipos de fármacos, identificando-se diferentes perfis de interação. Outro mecanismo de resistência a fármacos moduladores de microtúbulos consiste em uma superexpressão de isoformas da tubulina. Foram avaliadas, portanto, a citotoxicidade dos compostos em linhagens recombinantes expressando diferentes isoformas. Nenhuma das linhagens apresentou resistência às acridinonas avaliadas, diferentemente do que foi observado para os compostos referência (colchicina e paclitaxel). Estes resultados sugerem que as substâncias podem evitar o mecanismo de resistência relacionado à isoformas específicas (e.g, tubulina βIII). Como perspectivas, novos análogos estão sendo caracterizados e os mais promissores serão estudados detalhadamente. Além disso, serão investigados parâmetros farmacocinéticos *in vitro* para a identificação de candidatos com um melhor balanço entre

as propriedades farmacodinâmicas (e.g., potência, afinidade e seletividade) e farmacocinéticas.

Palavras-chave: Câncer. Tubulina. Planejamento de fármacos.

Referências:

1 KAVALLARIS, M. Microtubules and resistance to tubulin-binding agents. **Nature Reviews Cancer**, v. 10, n. 3, p. 194-204, 2010.

2 DUMONTET, C.; JORDAN, M. A. Microtubule-binding agents: a dynamic field of cancer therapeutics. **Nature Reviews Drug Discovery**, v. 9, n. 10, p. 790-803, 2010.

3 MAGALHÃES, L. G. et al. Discovery of a series of acridinones as mechanism-based tubulin assembly inhibitors with anticancer activity. **PLoS One**, v. 11, n. 8, p. e0160842-1-e0160842-17, 2016.

PG93

A study of the thermodynamic properties of quantum systems

MALAVAZI, A. H. A.[1]; BRITO, F. B. de[1]

andrehamalavazi@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos – USP

In recent years quantum thermodynamics has being consolidated as an active and fruitful research field. In particular, the experimental validation of fluctuation theorems in the quantum regime (1) has stimulated great efforts into this arena. Nevertheless, despite its fast development there are still fundamental and subtle issues to be addressed. (2) In this regard, quantum analogues of general thermodynamic quantities are not fully identified and established. For instance, there is no obvious or straightforward translation of work to the quantum regime, in particular it is known that since it characterizes a process there cannot exist an observable associated with it. (3) Although, quantum work has been commonly defined as the difference of energy measurements outcomes performed after and before a given thermodynamical protocol, such process is usually referred as the two-projective-energy-measurements procedure (TPM). However, regardless the success of this operational scheme under specific situations it does not apply to more general cases of interest, particularly considering the presence of coherence and non-unitary dynamics. In this sense, it is imperative to consider alternative approaches and possible definitions of these quantities. This project intends to address such questions following a different perspective and a distinct definition of quantum work and heat. By doing that it is expected that we will be able to investigate the quantum fluctuations relations and identify possible coherent quantum version of usual thermodynamic variables.

Palavras-chave: Quantum thermodynamics. Quantum fluctuation relations. Quantum work.

Referências:

1 BATALHÃO, T. B. et al. Experimental reconstruction of work distribution and study of fluctuation relations in a closed quantum system. **Physical Review Letters**, v. 113, n. 14, p. 140601-1-140601-5, 2014.

2 DEFFNER, S.; PAZ, J. P.; ZUREK, W. H. Quantum work and the informational cost of projective measurements. **Physical Review E**, v. 94, n. 1, p. 010103-1-010103-5, 2016.

3 TALKNER, P.; LUTZ, E.; HÄNGGI, P. Fluctuation theorems: work is not an observable. **Physical Review E**, v. 75, n. 5, p. 050102-1-050102-2, 2007.

PG94

Absorção de dois fótons degenerados em compostos da família das bi-calconas

MANOEL, D. da S.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]; DE BONI, L.[1]; GONÇALVES, P. J.[2]

sm1.diego@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP [2]Instituto de Física - UFG

Materiais que apresentam propriedades ópticas não lineares são de grande interesse para aplicações em fotônica. Além disso, materiais com tais características são importantes no que tange a pesquisa básica, permitindo o estudo e compreensão de processos não lineares, e de maneira geral, como a luz em altas intensidades interage com a matéria. Moléculas orgânicas com estruturas pi-conjugadas se destacam neste contexto pois, devido a deslocalização dos elétrons, são altamente polarizáveis, gerando altas não linearidades ópticas mesmo em condições não ressonantes (fora da banda de absorção do material). (1) Nesta direção, a família das bi-calconas são muito interessantes do ponto de vista da óptica não linear, pois possuem altas não linearidades de segunda e terceira ordem. Motivados por todos os fatores abordados, desenvolveremos neste trabalho um estudo das moléculas da família das bi-calconas, especificamente investigando a absorção por dois fótons degenerados via técnica de varredura-Z. (2) Para esta finalidade utilizaremos um laser de Ti:safira (Clark MXR CPA-2001) operando em 775 nm com uma taxa de repetição de 1 KHz. Acoplado a este sistema laser temos um amplificador óptico paramétrico (AOP), bombeado pelo laser descrito anteriormente, como fonte de excitação para a realização das medidas em diversos comprimentos de onda. Este sistema produz pulsos de excitação no intervalo de 450-1800 nm, dos quais escolhemos um intervalo conveniente as características das amostras. Nossos resultados preliminares já revelaram a presença do processo de absorção de dois fótons para diversos comprimentos de onda para algumas moléculas da família das bi-calconas, a partir dos quais é possível determinar os coeficientes de absorção não linear. A exemplo da molécula denominada R2, a qual apresentou um coeficiente de absorção não linear b = 0,0185 cm/GW para o comprimento de onda de 570 nm. Tais resultados são de grande importância para melhor entender o comportamento destes materiais e para posteriores aplicações em fotônica.

Palavras-chave: Absorção de dois fótons. Z-scan. Bi-calconas.

Referências:

(1) PRASAD, P. N.; WILLIAMS, D. J. **Introduction to nonlinear optical effects in molecules and polymers**. New York: Wiley, 1991.

(2) SHEIK-BAHAE, M. et al. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, p. 760-769, 1990.

PG95

Implementação de sequências rápidas de imagem por Ressonância Magnética

MARASSI, A. G.[1]; GOMES JUNIOR, F. G.[2]; TANNÚS, A.[1]

agide@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz - USP

A imagem por ressonância magnética é uma técnica experimental completamente não invasiva e não destrutiva, originada da interação de certos núcleos da amostra com um campo magnético, de forma que se pode obter informações estruturais com alta resolução e contraste. (1) A interação desses núcleos se dá através da codificação espacial das suas frequências de precessão, obtida com a aplicação de pulsos de gradiente de campo nas três dimensões espaciais. Como uma oportunidade de compreender a construção e aplicação de sequências de imagens tradicionais, como Gradiente Eco e Spin Eco (2), mostramos os primeiros resultados obtidos na implementação desses tipos de sequência em um sistema pré-clínico de 3T em desenvolvimento através de uma parceria de uma empresa de São Carlos, a Fine Instrument Technology – FIT, e a Victoria University of Wellington da Nova Zelândia. Por outro lado, no desenvolvimento de sequências rápidas de imagem serão apresentados os primeiros resultados obtidos com a sequência Zero Echo Time (ZTE) (3) para sementes de soja e milho, nas suas condições seca e hidratada, um trabalho voltado para a investigação da morfologia interna de sementes, visto que uma das dificuldades são os curtos tempos de relaxação dos tecidos presentes nessa estruturas.

Palavras-chave: Métodos de Imagem. Sementes. ZTE.

Referências:

1 TANNÚS, A. el al. NMR imaging at IFQSC. **Medical Physics**, v. 5, n. 5, p. 801-801, 1988.

2 CHEN, Q et al. Fast magnetic resonance imaging techniques. **European Journal of Radiology,** v. 29, n. 2, p. 90-100, 1999.

3 WEIGER, M. et. al. Exploring the bandwidth limits of ZTE imaging: spatial response, out-of-band signals, and noise propagation. **Imaging Methodology,** v. 74, n. 5, p. 1236-1247, 2015.

PG96

Design, desenvolvimento e testes de RPCs para o Observatório Pierre Auger

MARTINS, V. B.[1]; DE SOUZA, V.[1]; DOBRIGKEIT, C.[2]; LOPES, L.[3]; ASSIS, P.[3]; FERREIRA, M.[3]; LUZ, R.[3]; PIMENTA, M.[3], CONCEIÇÃO, R.[3]

victorbarbosamartins@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de Sao Carlos - USP

[2] Instituto de Física - UNICAMP

[3] Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Particulas de Portugal - LIP

O projeto de mestrado se insere em uma colaboração internacional para desenvolver e produzir 40 Resistive Plate Chamber (RPCs), que funcionam como detectores de múon. (1) A detecção destas partículas é importante para possibilitar a separação da componente muônica da componente eletromagnética de um chuveiro atmosférico iniciado por raio cósmico e por raio gama, respectivamente. (2) Além disso, essa separação das componentes nos leva a um cálculo mais preciso da energia da partícula inicial e das condições iniciais do chuveiro, uma vez que os múons são produzidos principalmente na alta atmosfera e não interagem tão fortemente com ela quanto os elétrons. Resumidamente, os objetivos deste projeto são: desenvolver junto com a indústria nacional e os colaboradores portugueses uma metodologia para fabricação de RPCs no Brasil; desenvolver um experimento de teste de cada RPC; analisar os dados deste experimento de teste, atestando a qualidade das RPCs; se houver tempo, instalar RPCs no Observatório Pierre Auger e analisar os dados dos primeiros chuveiros a serem detectados. O status atual do projeto é em execução. As duas primeiras RPCs já foram montadas. Para que os testes de eficiência sejam iniciados são necessários três RPCs em funcionamento. No momento, aguarda-se o envio dos volumes gasosos para os próximos detectores pela colaboração de Portugal. Enquanto isso, as caixas de alumínio e as placas de circuito são montadas em São Carlos.

Palavras-chave: Muon. RPC. Detector. Pierre Auger.

Referências:

1 ABREU, P. et al. Muon array with RPCs for tagging air showers (MARTA). In: INTERNATIONAL COSMIC RAY CONFERENCE,34th, ICRC,2015,Hague-Netherlands. **Proceedings...** Hague:2015.

2 STANEV, T. K;. GAISSER, S. T. T. High energy cosmic rays: sources and fluxes. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 742, p. 42–46, 2014.doi:.org/10.1016/j.nima.2013.11.094.

PG97

Quantum Maxwell demon using superconducting devices in non-thermal baths

MARTINS, G. F.[1]; BRITO, F. B. de[1]

gabriela.fernandes.martins@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

James Clerk Maxwell first presented to the public, in his notorious 1871 book "The Theory of Heat", a thought experiment in which a being, with faculties capable of following the individual dynamics of microscopic particles, would be able to produce a difference in temperature in a gas initially at an equilibrium state. This would, however, present a serious violation of the Second Law of Thermodynamics, as the entropy of the gas would decrease even though any work has been done to the system. The paradox created by the acting of this being, denominated Maxwell's demon, has tormented physicists during almost one century, and among this time, slightly different versions of the same problem have been idealized, as the Szilard Engine. Its revolutionary solution was proposed by Rolf Landauer and states that the information gathered by the demon, and stored in his physically limited memory, must be later erased, and the process of erasure of information is necessarily accompanied by an increase of entropy, what is known as Landauer's Principle. (1) With the evolution of technology and the miniaturization of devices during the last decades, the investigation of nano-mesoscopic systems, as superconducting circuits, undergoing specific and controlled processes has been made possible. Important concepts, discussed so far only theoretically, as the relation between entropy and information and even real implementations of Maxwell's demon started to be studied experimentally. Naturally, in this scenario of systems of small length scales and non-equilibrium processes, the usual Thermodynamics of macroscopic objects is expected to lose its validity. The analysis of systems in this new regime of operation has caught the attention of part of the scientific community during recent years, giving rise to a new and promising area of studies, denominated Quantum Thermodynamics. In the context of this emergent area, the purpose of this project is the development of a protocol for the implementation of the quantum version of an autonomous Maxwell's demon in a hybrid superconducting system. The device investigated has already been physically implemented, as also theoretically modeled, and is composed by a transmon, a specific type of superconducting qubit, coupled to a superconducting coplanar waveguide cavity and to a nanoresonator, with the last one acting as a thermal bath with externally controlled properties. (2) During the development of the project it will be investigated the possibility of existence of theoretical limits for the operation of the process, as the velocity of its execution and its efficiency.

Palavras-chave: Quantum thermodynamics. Quantum Maxwell's demon. Superconducting qubits.

Referências:

1 LEFF, H. S.; REX, A. F. (Ed.). **Maxwell's demon 2**: entropy, classical and quantum information, computing. Boca Raton, FL: CRC Press, 2002.

2 ROUXINOL, F. et al. Measurements of nanoresonator-qubit interactions in a hybrid quantum electromechanical system. **Nanotechnology**, v. 27, n. 36, p. 364003-1-364003-11, 2016.

PG98

Amplificação de sinal de fluorescência utilizando nanoestruturas formadas com laser femtossegundo: utilização para Protoporfirina IX

MATTOS, V. S.; [1] SOUZA, M. A. A. de; [1] YASUOKA, F. M. M.; [2] GUIMARÃES, F. E. G.; [1] PAOLILLO, F. R.; [1] CASTRO NETO, J. C. de[1]

vicente.mattos@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Paulista - UNIP

Quando há alta proximidade entre um fluoróforo e uma estrutura metálica, há o aumento da emissão de fluorescência, no processo chamado Metal Enhanced Fluorescence (MEF) que apresenta as características de aumento na taxa de emissão espontânea, aumento do rendimento quântico e diminuição do tempo de vida da fluorescência deste fluoróforo. (1) A PpIX é uma porfirina que pode ser endógena (derivada da degradação de glóbulos vermelhos, hemoglobina e bilirrubina) ou exógena (denominada de fotossensibilizador, é utilizado na terapia fotodinâmica). Ela é caracterizada por uma banda de Soret em 400 nm e quatro bandas-Q entre 500 e 600 nm. (2) Nano-ripples são nanoestruturas formadas sobre a superfície metálica quando esta interage com uma radiação com grande capacidade de excitação do material, o que gera estas estruturas periódicas, também denominadas LIPSS (Laser-Induced Periodic Surface Structures). A periodicidade das estruturas são tipicamente da ordem do comprimento de onda do laser, mas há grande dependência do material utilizado na marcação. (3) O objetivo do trabalho é caracterizar as estruturas formadas pela técnica de laser pulsado sobre metais (prata) para criação de nanoestruturas capazes de amplificar o sinal de fluorescência de fluoróforos, em especial, aplicado ao estudo da PpIX. Foi utilizada para as análises uma placa de prata 1000 de 25 x 25mm. A placa foi polida para remoção de ranhuras. Foram feitas 36 marcações de círculos com 2 mm de diâmetro cada. Para realizar as marcações foi utilizado o laser Ti:Saphira femtossegunto Libra/Coherent à 1 KHz. Foram variados os parâmetros de número de loops – quantidade de vezes em que o laser varrerá a amostra (de 1 a 100 loops); velocidade de varredura (entre 5, 7 e 30 mm/s); e potência de marcação (350 a 650 mW). As marcações individuais da placa foram caracterizadas utilizando as técnicas de Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) e Microscopia de Força Atômica (AFM). Com as imagens de MEV foram observadas nanoestruturas com periodicidade de aproximadamente 400 nm, e por volta de 10 [U+1D6CD]m de profundidade, conforme as medidas no AFM. A amostra de PpIX foi diluída em etanol, na concentração de 5 μg/ml. Esta amostra foi caracterizada utilizando o Espectrômetro de absorção e também analisado pelo espectro de fluorescência com excitação em 405 nm. Após a caracterização, foi utilizado microscopia confocal por fluorescência para análise da placa com filme fino da amostra com uso de spinning, ou rotação de forma a se obter filme homogêneo sobre a placa. Medidas iniciais indicaram aumento do nível de fluorescência em aproximadamente quatro vezes, comparando a emissão de fluorescência entre a região marcada da placa e a região não marcada. Além disso, foi observada maior homogeneidade e aderência da PpIX sobre as regiões com a marcação à laser. As próximas etapas de analise visarão encontrar os parâmetros de marcação adequados para obtenção de estruturas ainda

mais organizadas, de forma a amplificar ainda mais a interação superfície-porfirina, aumentando o sinal da mesma sobre as estruturas, assim como utilizar diferentes materiais (aço, titânio, etc.) para verificar o efeito de amplificação e comparar os diferentes resultados.

Palavras-chave: Fluorescência. Protoporfirina IX. Marcação à laser. Nanoestruturas.

Referências:

1 DENG, W et al. Metal-enhanced fluorescence in the life science: here, now and beyon. **Physical Chemistry Chemical Physics,** v.15, p.15695-15708,2013.doi:10.1039/C3CP50206f.

2 ROSSI, L.M et al. Protoporphyrin IX nanoparticle Carrier: preparation, optical properties, and singlet oxygen generation. **Langmuir,** v.24, n.21, p. 12534-12538,2008.

3 DUSSER, B. et al. Controlled nanostructures formation by ultra fast laser pulses for color marking; **Optics Express**, v.18, n. 3, p. 2913-2924,2010.

PG99

Encapsulamento de oligonucleotídeos de DNA em nanopartículas de quitosana

MELO, C. C.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]; BERNARDI, J. C.[1]

criscasonatomelo@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Tanto a terapia *antisense* como o RNA de interferência, são técnicas que buscam diminuir a tradução de uma proteína especificamente. A diferença principal dessas técnicas reside na maquinaria celular envolvida nesse processo. Enquanto o RNA de interferência precisa do complexo RISC para ser efetivo, os oligonucleotídeos *antisense* de DNA exploram a clivagem do duplex DNA-RNA pela RNase H. Porém, apesar de ser uma técnica que pode trazer muitas soluções para as doenças metabólicas, esses pequenos fragmentos de DNA ou RNA devem ser entregues para as células nas quais o gene de interesse esta sendo expresso. (1) Para isso, estratégias vem sendo utilizadas como a modificação de oligonucleotídeos e o nanoencapsulamento dessas estruturas, de modo que elas não sejam degradadas antes de atingirem seus alvos. A quitosana tem sido muito empregada na síntese de nanopartículas para entrega de genes e fármacos, não só pela facilidade da sua obtenção através da desacetilação da quitina, mas também por suas propriedades de biocompatibilidade, biodegradabilidade e por ser muco-adesiva. (2) Entretanto, existem quitosanas de variados pesos moleculares e com diferentes modificações químicas. Essa grande variabilidade pode resultar em tamanhos, estabilidades, solubilidades e citotoxicidade diferentes. Sendo assim, esse trabalho tem como intuito a comparação de quitosana de baixo peso molecular comercialmente disponível, quitosana despolimerizada, com grupos aminos quaternizados e conjugada com polietileno glicol. Todas essas variações de quitosana serão base para o encapsulamento de oligonucleotídeos de 20 bases. As quitosanas foram caracterizadas por ressonância nuclear magnética de átomos de hidrogênio, espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier, absorção no UV-Vis e cromatografia de exclusão de tamanho. A síntese da nanopartícula foi realizada pelo método de gelatinização ionotrópica com a adição de tripolifosfato de sódio e essas foram caracterizadas por absorção no UV-Vis, espalhamento de luz dinâmico e potencial Zeta. Além disso, a toxicidade das nanopartículas foi testada na linhagem celular NB4 que expressa um gene de proteína verde fluorescente, por teste de proliferação celular, analise da produção de espécies reativas de oxigênio e microscopia ótica. Ademais, com auxilio de ferramentas computacionais, foi desenhada uma sequência de DNA capaz de inibir a expressão da proteína verde fluorescente nas células NB4 que às superexpressam. Essa sequência foi encapsulada e está na sua fase de quantificação para verificar se a entrega de esse oligonucleotídeo *antisense* via nanopartículas de quitosanas é efetiva. Até o momento foi possível observar uma toxicidade diferencial entre as nanopartículas de quitosanas diferentes, bem como as propriedades físico-químicas das mesmas e sua estabilidade.

Palavras-chave: Nanopartículas. Quitosana. Oligonucleotídeos antisense.

Referências:

1 CROOKE, S. T. **Antisense drug technology: principles, strategiesfilho , and applications.** 2nd ed. New York : CRC Press, Taylor ¨"Francis 2008.

2 AHMED, T. A.; ALJAEID, B. M. Preparation, characterization, and potential application of chitosan, chitosan derivatives, and chitosan metal nanoparticles in pharmaceutical drug delivery. **Drug Design, Development and Therapy**, v.10, p.483–507. 2016.doi: 10.2147/DDDT.S99651.

PG100

Automontagem de filamentos de septinas estudada por microscopia eletrônica

MENDONÇA, D. C.[1]; PORTUGAL, R. V.[2]; CASSAGO, A.[2]; ARAÚJO, A. P. U. de[1]; MORAIS, S. T. do B.[1]; GARRATT, R. C.[1]

deborah.mendonca@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais - CNPEM

Septinas são GTPases do citoesqueleto e estão envolvidas em uma série de processos intracelulares incluindo divisão celular, tráfico de vesículas, exocitose , entre outros. (1) Essas proteínas já foram identificadas em vários eucariotos superiores, mas estão ausentes em plantas. Mudanças em seus níveis de expressão são associadas com algumas patologias em eucariotos, como cânceres e doenças neurológicas. (1) Porém, há ainda muitas informações sobre tais moléculas não esclarecidas, como seu papel da hidrólise de GTP e mecanismo de ação. Um outro aspecto interessante a ser estudado, cujo mecanismo ainda é pouco entendido, é que as septinas são capazes de se polimerizar na forma de hetero-oligômeros, resultando em filamentos que subsequentemente se organizam em estruturas de mais alta ordem. (2) Assim, este projeto objetiva análises de complexos de septinas ainda não estudados em termos estruturais, através da técnica de microscopia eletrônica de transmissão com análises de partícula única. Em humanos, há 13 genes que codificam septinas, classificadas em quatro grupos quanto à similaridade em relação à estrutura primária. (2) O complexo SEPT2-SEPT6-SEPT7 foi o melhor caracterizado, com uma estrutura cristalina resolvida à 4 Å. (1) Um dos complexos estudados por microscopia, neste projeto, foi o complexo formado pelas septinas de *Ciona intestinalis,* que não possui nenhuma informação estrutural na literatura. Este possui 4 genes que codificam septinas e com esse complexo iniciamos uma reconstrução 3D de baixa resolução com imagens de negative stain. Novas preparações estão sendo otimizadas em gelo vítrio para melhorar a resolução dos dados. 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. Microscopia eletrônica de transmissão. Análise de partícula única.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M. et al.Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature,** v.449, n.7160, p.311-15,2007.

2 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton.**Nature Reviews**:molecular cell biology, v.13, n.3, p.183-94,2012.

PG101

Desenvolvimento e estudos de estrutura-atividade de inibidores da enzima Diadenilato Ciclase de Staphylococcus aureus

MENEGHELLO, R.[1]; NAVARRO, M. V. de A. S.[1]

raphael.meneghello@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Adenosina monofostato dimérica cíclica, c-di-AMP, é um segundo mensageiro essencial em diversas espécies bacterianas, tanto Gram-positivos quanto Gram-negativos. (1) É responsável por uma variedade de processos fisiológicos como homeostase da parece celular, vigilância e reparo em DNA's ramificados, transporte iônico e regulação da expressão de genes. (2) O c-di-AMP é sintetizado a partir da condensação de 2 moléculas de ATP a partir da ação enzimática de proteínas que contém um domínio Diadenilato Ciclase - DAC - na presença de um cofator metálico divalente. No caso do patógeno humano *Staphylococcus aureus*, existe somente uma cópia do gene codificante para a diadenilato ciclase (DacA). Portanto, somente através da reação dessa enzima a bactéria é capaz de sintetizar esse importante segundo mensageiro, tornando a DacA um possível novo alvo terapêutico na busca de novos fármacos. (3) Neste trabalho, é mostrado ensaios de cristalografia do complexo enzima-inibidor, e ensaios bioquímicos para verificar a afinidade de novos compostos frente a DacA. Os resultados gerados aqui podem contribuir para o avanço dos estudos em diadenilatos ciclase como novo alvo terapêutico, principalmente em bactérias multi-resistentes, como a MRSA (*Staphylococcus aureus* meticilina-resistente).

Palavras-chave: c-di-AMP. Inibidores. Staphylococcus aureus.

Referências:

1 CORRIGAN, R. M.; GRUNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology**, v.11,p.513-524, 2013.doi:10.1038/nrmicro3069.

2 CORRIGAN, R.M. et al. c-di-AMP is a new second messenger in Staphylococcus aureus with role in controlling cell size and envelope stress. **PLpS Pathogens**, v.7, n.9, p.1002217, 2011.

3 ZHENG, Y.; ZHOU, J.; SAYRE, D. A.; SINTIM, H. O. Identification of bromophenol thiohydantoin as na inhibitor of DisA, a c-di-AMP synthase, from a 1000 compound library, using the coralyne assay. **Royal Society of Chemistry**, v.50, p.11234-11237, 2014.

PG102

Desenvolvimento de filtros baseados em transformadas wavelet para espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear

MENEZES, L. P.[1]; PAIVA, F. F.[1]

leon.menezes@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Dentre as aplicações da técnica de ressonância magnética nuclear na medicina, a espectroscopia permite a realização de diagnósticos clínicos através da quantificação localizada da concentração de metabólitos no paciente. Um dos desafios desta área está no processamento dos sinais adquiridos experimentalmente, em particular ao lidar com a presença de ruído nos espectros, que por sua vez dificulta o acesso às informações nele contidas através dos procedimentos de quantificação. Para melhorar a relação sinal-ruído destes espectros, é comum a utilização de filtros na etapa de processamento. Recentemente, diversas metodologias foram desenvolvidas utilizando transformadas wavelet para filtrar sinais de diferentes origens. Neste trabalho, aprofundamos os estudos com transformadas wavelet no contexto da espectroscopia por ressonância magnética, tomando como ponto de partida estudos prévios (1) e desenvolvendo também dois novos métodos, aprimorando os resultados anteriores. Enquanto a metodologia empregada em todos estes filtros é semelhante (também conhecida por *Wavelet Shrinkage Denoising*, ou WSD), estes se diferenciam pela utilização de diferentes critérios de limiarização. A eficiência de cada critério foi primeiro analisada em sinais simulados, tal que fosse possível estabelecer os parâmetros que otimizassem sua atuação. Uma vez encontradas as condições ótimas para cada filtro, estes foram aplicados sobre sinais *in vivo* obtidos experimentalmente. Os resultados apresentam uma grande melhora na performance do filtro com os dois critérios desenvolvidos neste trabalho, em comparação a ganhos modestos na relação sinal-ruído utilizando o critério abordado previamente na literatura.

Palavras-chave: Espectroscopia por Ressonância Magnética. Processamento de sinais. Transformada wavelet.

Referências:

1 CANCINO-DE-GREIFF, H. F. et al. Signal de-noising in magnetic resonance spectroscopy using wavelet transforms. **Concepts in Magnetic Resonance**, v. 14, n. 6, p. 388-401, 2002.

PG103

Nucleação de uma rede de vórtices com um feixe de agitação num condensado de Bose-Einstein

MERCADO, E. G.[1]; CASTILHO, P. C. M.[1]; FARIAS, K.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

emmanuel.dv@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Condensados de Bose-Einstein (BEC's) é considerado como um sistema quântico macroscópico no qual nós podemos observar e estudar propriedades quânticas da matéria no laboratório. (1) Uma destas propriedades, é que se comporta como um superfluido, liquido com viscosidade nula. Neste trabalho mostramos o proceso de nucleação de vortices num condensado de Bose-Einstein de Sódio (23Na) produzido numa armadilha óptica cruzada. Colocando um feixe de agitação encima dos átomos e girandolo, é adicionado momento angular que gera vórtices como resultado do movimento dos átomos devido ao potencial repulsivo do feixe de agitação. Os vórtices são observados como um buraco no perfil de densidade dos átomos na imagem de absorção, apresentando um arreglo triangular a qual minimiza a energia do sistema. Foi medido o tempo de vida dos vórtices e a velocidade critica a qual são nucleados, mostrando que a maior frequência de rotação do feixe de agitação aparecem uma maior quantidade de vórtices.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Velocidade critica. Vórtices.

Referências:

1 KETTERLE, W. Nobel lecture: when atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. **Reviews of Modern Physics**, v. 74, n. 4, p. 1131-1151, 2002.

PG104

Atividades ópticas de DNA em presença de plasmons polaritons de superfície

MIRANDA, M. M. P.;[1] MAREGA JÚNIOR, E.[1]

messiasmpm@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

As propriedades ópticas das moléculas de DNA são importantes para nano-fabricação de dispositivos fotônicos. Devido as características ópticas e dielétricas do DNA. Em filmes finos de DNA de dupla hélice; as constantes óticas como o índice de refração, coeficiente de extinção, faixa de banda óptica, dielétrica, tempo constante de relaxamento, fator de dissipação, birrefrigência e condutividade óptica. São fundamentais na determinação da transmitância e espectros de dispersão do índice de refração. Que tratados matematicamente com acoplamento plasmon com fuorescência, na concepção das constantes dielétricas de metais nobres. O estudo de absorção óptica do DNA tem sido muito útil para a explicar estruturas opto-eletônicas de dispositivos baseados na luminescência biomolecular de material genético sob influência de irradiação eletromagnética. Os métodos de espectroscopia incluindo o Microscopio Confocal; são amplamente utilizados para estudar os polinucleotídeos, devido às propiedades opto luminescêntes desas estruturas formadoras do DNA, em complementaridade à opção do uso dessas técnicas sensíveis ao comportamento biofísico desses oligonucleotideos. Na Ressonância Plasmônica de Superfície Localizada (*Localized Surface Plasmon Resonance-LSPR*), utiliza ressonância de plásmons de superfície propagantes, geradas por plasmons, causando um efeito foto-eletrônico entre as camadas de valência das biomoléculas (DNA) e do metal (Prata), aumentando a sensibilidades da captação das informações ópticas. A luz é dispersada devido a influência significativa de um feixe de luz monocromática incidente sobre a amostra. (1) Estas alterações que caracterizam o material a ser analisado na superfície. A espectroscopia de fuorescência é uma tecnologia que utiliza a luz e seus efeitos energeticos sobre biomelucas, aginto nos pontos quânticos da camada de valência dos átomos que compõem a estrutura da biomolécula. Os segmentos de DNA são birrefrigentes devido a configuração da dupla hélice. A sua birrefringência elétrica se expressa como uma função da polarizabilidade ótica oscilando no comprimentos de onda visível. A contribuição das diferentes bandas de absorção da birrefringência elétrica nas interações plasmônicas em superfície e incrementa o índice de refração do DNA, contribuindo para melhoramento da detecção *in situ* das moléculas por resposta de florescência à propagação plasmônica sob a excitação na superfície metálica, e ao feixe de luz incidente. No presente trabalho foi verificado por técnica Fotoluminescência de Microscopia Confocal, as propriedades de DNA presentes em superfície da nanocamada de prata por luminescência estimulada no comprimento de onda de 800 nm. Comparada com superfície de vidro, afim de avaliar a resposta de ressonânica, e a fluorescência do DNA sobre a nanocamada de prata é mais sensivel que sobre o vidro. Devido à resposta plasmônica que estes metais apresentam, e a resposta luminescente da molécula de DNA à excitação de plasmon na superfície. Além de verificar quanto a variação do comprimento de onda aumenta a partir da luminescência do DNA através da fotoluminêscencia nas três diferentes condições estudadas, graças ao comportamento dielétrico do DNA e também devido às constantes dielétricas do metais nobres, diferentemente do vidro. (2, 3)

Palavras-chave: Fotoluminescências. Birrefrigências. Dispositivos fotônicos. Plasmons-polaritons. Opto-eletônicos.

Referências:

1 AMERICAN THORACIC SOCIETY. Diagnostic standards and classification of tuberculosis in adults and children. **American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine**, v. 161, n. 4, pt. 1, p. 1376-1395, 2000.

2 AZEVEDO, C. G. G. **Caracterização óptica e eletrônica de filmes semicondutores usando espectros de transmitância e refletância**. 2015. 131p. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais) - Faculdade de Ciências, Universidade Estadual Paulista Julio de Mesquita Filho, Bauru, 2015.

3 BASSO C. R. **Detecção do vírus da cinomose canina por diferentes metodologias analíticas**, 2015. 68 p. Dissertação de Mestrado (Mestrado em Biociências) - Instituto de Biociêcias de Botucatu, Universidade Estadual Paulista Julio de Mesquita Filho, Botucatu, 2015.

PG105

Measuring the influence of the laser pulse width on nonlinear refractive index of solvents measured

MIGUEZ, M. L.[1]; MISOGUTI, L.superscript1

malumiguez@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The nonlinear refractive index, n_2, can arise from different third-order nonlinear processes such as ultrafast electronic, instantaneous, and slow orientation, noninstantaneous nonlinearities, for example. In general, organic solvents present both, electronic and orientational nonlinearities, which need to be discriminated to be corrected characterized. The purpose of distinguish instantaneous from noninstantaneous nonlinearities, time resolved pump-probe techniques using different pulse width can be employed. (1) Explore the response time of the nonlinearity is a good alternative to distinguish the origins of noninstantaneous nonlinearities. Organic solvent, normally, have third-order nonlinearity from nearly instantaneous bound-electronic and several noninstantaneous nuclear contributions depending of the pulse width. Here we investigate how the response time and the magnitude of nonlinearities in the femtosecond (fs) range of different organic solvents affect distinctly the nonlinear refractive indices (n_2) when the pulse width changes. In order to see that, we have used a newly self-referenced nonlinear ellipse rotation (NER) method (2) to measure precisely the n_2 as a function of pulse width. In order to get the contribution of slow orientational nonlinearities, we change the pulse width since we expect that such nonlinear effects gives the predominant contribution for the NER signal for long pulses. Several organic solvents such as CS_2, acetone, methanol and chloroform were characterized with NER measurements. To measure liquids using this NER method, we use a silica cuvette filled with the liquid as sample. In this case, the NER signal of the cuvette walls is used as reference. It is possible to determine simultaneously the liquids and silica nonlinearities in a single scan and single beam for different pulse width. As we know, silica is one of the most popular material to state the pure electronic refractive nonlinearity ($n_2 = 2,5 \times 10^{-16}$cm^2/W), which is constant in a wide range of pulse width. Using a commercial fs Ti:sapphire laser ($\lambda = 800$ nm, 1kHz, ≈ 50 fs, Dragon, K&M Labs) and its pulse compressor the pulse width could be changed in a good temporal range spanning from 50 fs up to ≈ 700 fs. This procedure can be adopted since silica presents only a pure electronic nonlinearity, which is a constant independently of the pulse width. On other hand, organic solvents also have contribution from slow orientational nonlinear refractive indices, which normally grow as the pulse width increase. We observed that the NER signals of organic solvents grow as the pulse width increase indicating the contribution of strong orientational effect, which agrees with one observe in the literature. (1) It is worth to mention that even without using any complicated time resolved method; we were able to infer the contribution of two types of nonlinearities indices of refraction in several organic solvents.

Palavras-chave: Nonlinear ellipse rotation. Organic solvents. Nonlinear processes.

Referências:

1 REICHERT, M. et al. Temporal, spectral, and polarization dependence of the nonlinear optical response of carbon disulfide. **Optica**, v. 1, n. 6, p. 436–445, Dec. 2014.

2 MIGUEZ; M. L. et al. Measurement of third-order nonlinearities in select solvents as a function of the pulse width. **Optics Express**, v. 25, n. 4, p. 3553–3565, Oct. 2017.

PG106

Descelularização de traqueias utilizando equipamento multifuncional combinando técnicas da fotônica.

MION, W. M.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; DEFFUNE, E.[2]

wonermion@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Faculdade de Medicina de Botucatu - UNESP

Problemas traqueais e estenoses oriundos de anomalias congênitas, processos traumáticos, câncer e infecção continuam sendo um grande problema para medicina. (1) Apesar do avanço nas técnicas cirúrgicas e desenvolvimento de produtos substitutivos para traqueias humanas, principalmente os naturais, o transplante de traqueia continua sendo um desafio para comunidade científica. (2) O uso de traqueias humanas descelularizadas e recelularizadas com células autólogas envolve um processo laborioso, de alto custo, por suas múltiplas etapas complexas e produtos enzimáticos caros. Isto demanda tempo muitas vezes escasso pela condição clínica do paciente e nem sempre com propriedades aceitáveis para implante. Além disto, inexiste na literatura, critérios bem estabelecidos de controle da qualidade da traqueia descelularizada, para validá-la para uso em transplantes(3). Diante desse cenário pretende-se propor equipamento multifuncional para realização completa do processo de decelularização de traqueias, envolvendo processos físicos, mecânicos, de biofotônica e ultrassom que podem garantir um *scaffold* com padrões de qualidade reprodutíveis quanto as características mecânicas e físico-químicas para futura semeadura de células e implante.

Palavras-chave: Descelularização. Traqueia. Scaffold. Multifuncional.

Referências:

1 LOTT, D. G. What is the future of 'organ transplantation' in the head and neck? **Current Opinion Otolaryngology Head and Neck Surgery,** v. 22, n. 5, p. 429-35, 2014.

2 MACCHIARINI, P. et al. Clinical transplantation of a tissue-engineered airway. **Lancet,** v. 372, n. 9655, p. 2023-30, 2008.

3 PARTINGTON, L. et al. Biochemical changes caused by decellularization may compromise mechanical integrity of tracheal scaffolds. **Acta Biomaterials,** v. 9, n. 2, p. 5251-61,2013.

PG107

Redução de fase em osciladores de ciclo limite estocásticos

MONTEIRO, V. M.[1]; MAIA, L. P.[1]

vimarqmon@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Ciclos Limite são trajetórias fechadas e isoladas no espaço de fase e encontrados em sistemas não lineares. São importantes na modelagem de oscilações auto sustentadas, presentes em circuitos elétricos, células cardíacas e neurais e em reações químicas. (1) Podemos parametrizar ciclos limites biunivocamente por meio de uma única variável, chamada de fase. Define-se ainda, para ciclos com estabilidade assintótica, a fase para pontos na vizinhança da órbita, permitindo uma análise unidimensional do sistema, fazendo da redução de fase uma importante ferramenta no estudo desses osciladores. (2) Superfícies de fase constante são denominadas isócronas e quaisquer trajetórias determinísticas iniciando em uma mesma isócrona, convergem para tempo infinito. Mas quando osciladores de ciclo limite são sujeitos a ruído – estocasticidade de algum tipo – perde-se a definição de fase, uma vez que o tempo não é mais um parâmetro biunívoco da trajetória, e as equações usuais para a fase perdem sua validade mesmo para ruído fraco, branco e gaussiano. No presente trabalho, apresentamos uma definição do conceito de fase para osciladores de ciclo limite estocásticos, baseada na generalização do conceito de isofases, superfícies cujo tempo (médio, para o caso geral) de primeiro retorno é constante e igual ao período do ciclo limite. No caso determinístico, isofases também são isócronas. A presente abordagem mostra-se útil para a determinação da fase em vários tipos de osciladores (e.g. não-Markovianos, com coexistência de ciclos limite e induzidos por ruído). (3) Apresentamos ainda, um método numérico para a determinação de isofases em um espaço de configuração bidimensional.

Palavras-chave: Redução de fase. Osciladores de ciclo limite. Sistemas dinâmicos estocásticos.

Referências:

1 STROGATZ, S. H. **Nonlinear dynamics and chaos**: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering. Reading, MA: Perseus Books, 1994. (Studies in nonlinearity).

2 KURAMOTO, Y. **Chemical oscillations, waves and turbulance**. Berlin: Springer, 1984. (Springer series in synergetics, v. 19).

3 SCHWABEDAL, J. T. C.; PIKOVSKY, A. Phase description of stochastic oscillations. **Physics Review Letters**, v. 110, n. 20, p. 204102-1-204102-5, 2013.

PG108

Avaliação da acurácia do modelo de carbono em solos- CQESTR- em sistemas agrícolas Brasileiros

MORAES, R. R. D. de[1]; VILLAS-BOAS, P. R.[2]

raphael.moraes@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Embrapa Instrumentação Agropecuaria - CNPDIA

O clima de nosso planeta tem mudado recentemente como o aumento da média de temperatura e a elevação do nível dos oceanos, causados principalmente pelo aumento do efeito estufa devido primariamente a uma maior emissão do gás carbônico. É, portanto, de suma importância descobrir maneiras de diminuir essa emissão ou armazenar o carbono em outros lugares como solo ou água. No solo podemos armazenar uma maior quantidade de carbono adotando outros manejos em plantações que reduzam a decomposição e elevem a sua quantidade no solo. Saber quais culturas e manejos são adequados para tal fim tem um alto custo e levam um grande tempo de estudo para se ter respostas adequadas. Para contornar essas dificuldades podemos usar modelos computacionais que simulam o ciclo do carbono. Existem muitos simuladores com tal fim, desde os mais simples até complexos simuladores, como o DNDC e o Century. No nosso trabalho temos avaliado a acurácia do modelo CQESTR (1), que simula a decomposição da matéria orgânica em três fases: a primeira de decomposição rápida, a segunda de decomposição lenta e a terceira de transferência e estabilização da matéria orgânica do solo (MOS). Em todas as etapas o modelo considera que a taxa de acumulo de matéria orgânica é um decaimento exponencial, dependente da quantidade de resíduo na etapa anterior, uma constante universal, fatores de correção para condições não otimizadas, que variam de etapa para etapa, como umidade, taxa de nitrogênio no solo, tipo e drenagem do solo, e o tempo termal (do inglês *Cumulative Degree-Days* – CDD). Na etapa de transferência e estabilização, após 15.000 CDDs, o resíduo é adicionado ao reservatório de matéria orgânica do solo. De forma a se calcular esses fatores são fornecidas ao programa informações sobre manejo (como forma de preparo do solo e tipo de implementos agrícolas utilizados), média de temperatura e pluviométrica e quantidade de resíduos gerados pelas culturas plantadas. O objetivo deste estudo é avaliar a acurácia do modelo CQESTR em diferentes locais e solos do Brasil, em diferentes manejos e culturas, confrontando os resultados das simulações com os dados experimentais encontrados em artigos, dissertações e teses. Neste trabalho, avaliamos um sistema de pastagem em Planaltina DF (2) e rotação de trigo e soja em Londrina PR e em Passo Fundo RS sob cultivo convencional e conservador. A simulação dos experimentos resultou em curvas de formato semelhante aos dos dados experimentais, que no caso do sistema de pastagem, foram estatisticamente idênticos. Assim, podemos concluir que o CQESTR tem simulado satisfatoriamente o estoque de carbono em experimentos de pastagem e rotação de trigo e soja tanto na região sul quanto no centro oeste brasileiro.

Palavras-chave: Sequestro de carbono. Aquecimento global. CQESTR. Estoque de carbono.

Referências:

1 LIANG, Y. et al. Simulating soil organic matter with CQESTR (v. 2.0): Model description and validation against long-term experiments across North America. **Ecological Modelling**, v.220, n.4, p. 568-681,2009.

2 FERREIRA, E. A. B. **Dinâmica de longo prazo do carbono do solo em sistemas de manejo no Cerrado**. 2013. 235f.Tese (Doutorado em Ecologia) - Universidade de Brasilia, Brasilia, 2013.

PG109

Produção e estudos estruturais de complexos de septinas

MORAIS, S. T. do B.[1]; MENDONÇA, D. C.[1]; ARAÚJO, A. P. U. de[1]

br.sinara@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas que ligam GTP e interagem entre si formando heterocomplexos os quais formam filamentos e estruturas de maior nível de organização como feixes e anéis. Tais filamentos, além de se mostrarem importantes durante a citocinese também podem estar envolvidos em outros processos celulares tais como determinação da polaridade celular e reorganização do citoesqueleto. Em humanos são encontrados 13 genes que codificam septinas, as quais estão divididas em 4 grupos com base na similaridade de sua organização estrutural. Análises filogenéticas realizadas utilizando sequências de septinas pertencentes a diferentes organismos levou a identificação de quatro septinas ortólogas no urocordado *Ciona intestinalis*, as quais apresentam, cada uma, identidade com um dos quatro grupos de septinas descritos em mamíferos. (1) Pouco se sabe sobre a estrutura dessas proteínas, principalmente das interfaces de interação que formam os heterocomplexos, sendo que o complexo formado pelas septinas humanas 2, 6 e 7 é o único já caracterizado estruturalmente até hoje, tendo sido empregado em estudos comparativos. (2) Nesse sentido, este trabalho traz duas abordagens para o estudo dessas proteínas, as quais compreendem tanto o estudo das septinas de *C. intestinalis*, como também prosseguir o estudo do heterocomplexo de humanos, já validado, formado pelas septinas 5, 7 e 8. No andamento deste trabalho, as proteínas de *C. intestinalis* foram expressas e analisadas individualmente, o que permitiu a caracterização bioquímica e biofísica. Além disso, confirmou-se por co-purificação, a interação destas proteínas na forma de um heterocomplexo, o qual foi observado, por Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET), formando estruturas filamentosas. Análises de reconstrução tridimensional em colaboração com a mestranda Deborah Mendonça levaram a observação do envoltório desse heterofilamento em maiores detalhes, permitindo estudos comparativos com o heterocomplexo SEPT2/6/7, os quais ainda estão em andamento. Paralelamente, análises de MET também estão sendo realizadas com o oligômero SEPT5/7/8. Visando a caracterização estrutural e estudos comparativos dos complexos, estão sendo realizados ensaios de cristalização e tanto cristais do complexo das septinas humanas 5, 7 e 8, quanto do formado pelas septinas 7 e 9 de *C. Intestinalis* foram obtidos. Finalmente, serão realizados ensaios com sistemas biomiméticos de membrana, com os dois heterocomplexos, afim de avaliar a capacidade desses filamentos interagirem com a membrana, avaliando o efeito dessa interação.

Palavras-chave: Septinas. Heterocomplexos. Estudos estruturais.

Referências:

1 CAO, L. et al. Phylogenetic and evolutionary analysis of the septins protein family in metazoan. **FEBS Letters**, v. 581, n. 28, p. 5526-5532, 2007.

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

PG110

Time reversibility in quantum theory described in an operational framework

MORAZOTTI, N. A. da C.[1]; NAPOLITANO, R. de J.[1]

nicolas.morazotti@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Quantum theory, in its traditional formulation, is not symmetric under time reversal. If we just reflect time, Born's transition probability rule does not apply anymore. In 1964, Aharonov, Bergmann, and Lebowitz (1) have made a new quantum theory formulation, symmetric under time reversal. It involves the notion of post-selection. One way of describing quantum theory is via Operational-Probabilistic Theories (OPTs). OPTs associate operational diagrams, called circuits, with a probabilistic theory. Systems are represented by wires, and operations - physical apparatus, with an input and an output system - are drawn as boxes. If the operation input is a trivial system, it is called a preparation. Conversely, if the output is the trivial system, it is called a measurement. Circuits are diagrams composed by wires and boxes with no open wires.Symmetry transformations, in the usual quantum theory, are given by Wigner Theorem: a symmetry transformation is either linear and unitary or antilinear and antiunitary, which is the case of time reversal. Notice that time reversal takes states, elements of the set of preparations, to effects, elements of the set of measurements, and vice-versa. Consequently, in this framework, Wigner Theorem is not the most general possible, once it only accounts for maps of one space to itself. Chiribella, D'Ariano, and Perinotti (2) have shown that quantum theory is a special case of OPT that follows, besides other things, causality. Causality implies that probabilities of preparation events must not depend on probabilities of measurement events. However, notice that the opposite is true: measurement probabilities can depend on preparation probabilities, leading to an asymmetry. Oreshkov and Cerf (3) discuss a generalized formulation for OPTs which gives us both causality and time symmetry by describing possible events in a given box, conditional on information obtained without looking into other boxes in the circuit, irrespectively of when the information is available. In this work, besides studying this framework of quantum mechanics, one target is to find the specific transformation that gives us time reversal. As well as in the usual framework, it does depend if the particle has spin. Also, this framework is suited for finite-dimensional Hilbert spaces. We wish to be able to apply this generalized Wigner Theorem to wave-packet collisions. Consequently, we need to truncate the Hilbert space's dimension.

Palavras-chave: Quantum mechanics. Time reversal. Operational probabilistic theories.

Referências:

1 AHARONOV, Y.; BERGMANN, P. G.; LEBOWITZ, J. L. Time symmetry in the quantum process of measurement. **Physical Review**, v. 134, n. 6B, p. B1410-B1416, 1964.

2 CHIRIBELLA, G.; D'ARIANO, G. M.; PERINOTTI, P. Probabilistic theories with purification. **Physical Review A**, v. 81, n. 6, p. 062348-1-062348-40, 2010.

3 ORESHKOV, O.; CERF, N. J. Operational formulation of time reversal in quantum theory. **Nature Physics**, v. 11, n. 10, p. 853-858, 2015.

PG111

Fases parasistas na origem do momento magnetico nos filmes finos de BiFeO3 crescidos por baixa taxa de deposição RF sputtering.

MORI, T. J. A.[1]; MOULS, C. L.[1,2]; MORGADO, F. F.[3]; SCHIO, P.[1]; CEZAR, J. C.[1]

ferraz.f@usp.br

[1]Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - CNPEM

[2]Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

[3]Instituto de Física de São Carlos - USP

Materiais que apresentam duas ou mais ordens ferróicas são chamados de multiferróicos. (1) Dentre os vários materiais multiferróicos, a ferrita de bismuto ($BiFeO_3$, BFO) é bastante estudada devido a suas diversas aplicações e propriedades como acoplamento anti-ferromagnético e ferroelétrico com transições acima de 300 K. (2) Neste trabalho foi estudada a influência da temperatura nas características estruturais e magnéticas da ferrita de bismuto em escalas nanométricas. Para isso foram crescidos filmes finos de BFO por RF magnetron sputerring com baixas taxas de deposição (alta pressão de oxigênio), variando a temperatura de crescimento de 400 até 700 °C. As características estruturais e magnéticas foram determinadas a partir de técnicas como difração de raios-X, microscopia de força atômica e magnetometria SQUID. Com o aumento da temperatura houve uma melhora na qualidade da epitaxia dos filmes, entretanto fases espúrias de bismuto e fases super-tetragonais de BFO foram encontradas nos filmes de maiores temperaturas. A presença de óxido de ferro a-F ($\gamma - Fe_2O_3$ em um dos filmes pode ter originado o comportamento histerético ferromagnético enquanto que a presença das misturas de fases do BFO em uma outra amostra pode ter originado um momento magnético maior e não histerético. (3)

Palavras-chave: Multiferroics. Magnetoelectrics. Parasitic phases.

Referências:

1 SCHMID, H.Multi-ferroic magnetoelectrics. **Ferroelectrics**, v.162, n.1, p.317,1994.

2 CATALAN,G; SCOTT, J. F. Mesoporous materials: dye-anchored mesoporous antimony-doped tin oxide. **Advanced Materials,** v.21,n.24,p. 2463, 2009.doi:10.1002/adma.200990091

3 HE, Q. et al. Electrically controllable spontaneous magnetism in nanoscale mixed phase multiferroics. **Nature Communications**, v.2, p.225,2011.doi:10.1038/ncomms1221.

PG112

Exoproteoma, clonagem, expressão e caracterização heteróloga de enzimas termofílicas do fungo Thielavia terrestris com aplicação biotecnológica

MULINARI, E. J.[1]; SEGATO, F.[2]; PRADE, R. A.[3]; MUNIZ, J. R. C.[1]

evandro.mulinari@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Escola de Engenharia de Lorena - USP

[3] Universidade do Estado de Oklahoma

A degradação enzimática dos polissacarídeos que compõem a biomassa lignocelulósica de maneira rápida, eficiente e robusta é, atualmente, um grande desafio para produção de biocombustíveis e outros compostos químicos. Um dos pré-requisitos necessários, é a disponibilidade de enzimas que hidrolisam celulose, hemicelulose e outros polissacarídeos que compõem a parede celular das plantas em açúcares fermentescíveis adequados para a utilização industrial. Majoritariamente, celulases e hemicelulases utilizadas nos processos biotecnológicos e bioindustriais são produzidas por fungos do gênero *Trichoderma, Aspergillus e Penicillium*. Estas enzimas, geralmente, são estáveis em temperaturas pouco elevadas (entre 40 e 50 °C). O desenvolvimento de enzimas que apresentem maior estabilidade térmica, diminuindo as chances de contaminação dos reatores, aumentando a taxa de hidrólise e aumentando a transferência de massa pela redução da viscosidade do meio, favoreceria um processo mais econômico. (1, 2) Dessa forma, foram conduzidos experimentos para prospecção e detecção de proteínas presentes no exoproteoma do fungo termofílico *Thielavia terrestris* cultivado em diferentes fontes de carbono como bagaço de cana-de-açúcar *in natura* (BCIN), explodido à vapor (BCEV) e polpa Kraft branqueada (CEL), utilizando a técnica de LC-MS/MS. As análises mostraram uma enzima da família GH3 como a maior constituinte do secretoma em CEL e uma GH7 contendo CBM1 para BCEV e BCIN. O conteúdo proteico da condição BCIN mostrou um repertório de hemicelulases que representaram 8% do total da contagem de espectros normalizados (NTSC) em comparação a 4% em CEL e BCEV, refletindo o efeito da diferença de composição da biomassa na indução das proteínas secretadas. As análises também revelaram um conteúdo proporcional de celulases e atividades auxiliares (AAs), justificando a alta atividade em substrato celulósico e revelando a presença de mecanismos oxidativos neste microrganismo durante a degradação da biomassa. Uma vez identificada as enzimas do fungo termofílico *T. terrestris* que participam do arsenal de degradação da biomassa, a seleção de alvos para expressão heteróloga direcionará a estudos funcionais e estruturais, que contribuirão para um melhor entendimento sobre a estrutura, o mecanismo e a função destas proteínas, fornecendo subsídios para o desenvolvimento de coquetéis enzimáticos ou na suplementação dos já disponíveis, de forma a melhorar a eficiência destes no processo de despolimerização da biomassa lignocelulósica.

Palavras-chave: Fungos termofílicos. Thielavia terrestris. Secretoma. Enzimas oxidativas

Referências:

1 BERKA, R. M. et al. Comparative genomic analysis of the thermophilic biomass-degrading fungi Myceliophthora thermophila and Thielavia terrestris. **Nature Biotechnology,** v. 29, n. 0, p. 922-7, 2011.

2 MAHESHWARI, R.; BHARADWAJ, G.; BHAT, M. K. Thermophilic fungi: their physiology and enzymes. **Microbiology and Molecular Biology Reviews,** v. 64, n. 3, p. 461-88, 2000.

PG113

Estudos bioquímicos e estruturais de duas carboxilesterases de Bacillus licheniformis

NAKAMURA, A. M.[1]; GODOY, A.[1]; KADOWAKI, M. A. S.[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]; POLIKARPOV, I.[1]

aline.nakamura@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Esterases são biocatalisadores amplamente utilizados em processos industriais devido a sua versatilidade enquanto mantém alta régio- e enantioseletividade. (1) Além disso, não necessitam de co-fatores e são estáveis em diversos solventes orgânicos. Embora *Bacillus licheniformis* seja muito aplicado em processos industriais e biotecnológicos, nenhuma estrutura de carboxilesterase desse organismo foi registrada até o momento. Neste período de projeto avançamos com estudos estruturais e bioquímicos de duas carboxilesterases de *B. licheniformis*, BlEst1 e BlEst2. Para BlEst1 já nos encontramos em etapas mais avançadas de caracterização. Obtivemos um conjunto de dados de difração de raios X com 2,4 Å de resolução que revelou um domínio catalítico do tipo α/β hidrolase e um domínio menor, constituído de α-hélices, adjacente ao sítio ativo formando um bolso onde provavelmente o substrato é acomodado. BlEst1 apresentou atividade ótima a 40°C e pH 7,0. Um estudo de termoestabilidade revelou que ela mantém atividade residual de 40% após 72h de incubação a 40°C. Ensaios de especificidade contra substratos de diferentes tamanho de cadeia ligados a p-nitrofenol mostraram que BlEst1 é mais ativa contra p-nitrofenil acetato, um éster com cadeia de dois carbonos. Alinhamos a estrutura de BlEst1 com enzimas homólogas o que nos permitiu fazer algumas observações correlacionando estrutura e especifidade. Nós sugerimos que o segundo domínio de BlEst1 forma um sítio de ligação ao substrato aberto ao solvente, apresentando apenas um pequeno bolso hidrofóbico, o que torna energeticamente desfavorável a ligação de substratos de cadeia longa. Para aferirmos a capacidade de síntese de BlEst1, realizamos estudos preliminares com zimogramas e a enzima se mostrou ativa em diferentes preparações contendo ácido hexanóico com álcoois que diferem em tamanho de cadeia e estrutura. Recentemente, obtivemos duas estruturas com ligantes de diferentes tamanhos de cadeia de carbonos que ainda estão em fase de refinamento para posterior análise. Para a esterase BlEst2 obtivemos alguns resultados bioquímicos. Ela apresenta um platô de atividade entre pH7 e pH8 e temperatura ótima em 40°C. Como BlEst1, apresenta preferência por substratos de cadeia curta sendo p-nitrofenil acetato o substrato contra o qual possui maior atividade. Obtivemos um conjunto de dados de difração de raios X que está em fase final de refinamento. Diferentemente de BlEst1, BlEst2 apresenta dois domínios além do core catalítico típico de α/β hidrolase. O término do refinamento nos permitirá tecer melhores discussões sobre esta estrutura.

Palavras-chave: Carboxilesterase. Bacillus licheniformis.

Referências:

1 KAPOOR, M.; GUPTA, M. N. Lipase promiscuity and its biochemical applications. **Process**

Biochemistry, v..47, n.4, p.555-569,2012.

PG114

A matematização da eletrostática no século XVIII: um estudo histórico-crítico

NARDI, L. M. C.[1]; SILVA, C. C.[1]

lucas.nardi@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Este projeto visa estudar o processo histórico de matematização dos estudos elétricos entre a segunda metade do século XVIII e primeiras décadas do XIX. É claro que a matemática já era extremamente importante para a física antes do século XVIII, pois já era presente nos estudos sobre astronomia e mecânica.. Com os avanços nos estudos da gravitação e mecânica de Newton, Huygens e outros ao longo do século XVII e os trabalhos do matemático Leonhard Euler no XVIII, a matemática se tornou cada vez mais uma maneira de argumentar, de raciocinar, sendo fonte de uma nova maneira de estudar a filosofia natural. Com os debates acadêmicos sobre a natureza da eletricidade na Europa e a simultânea consolidação do paradigma newtoniano, um personagem adquire uma importância especial, era Franz Ulrich Theodosius Aepinus (1724-1802), nascido em Rostock (atual norte da Alemanha). Trabalhou pessoalmente com Euler quando estudou em Berlim, conhecia os trabalhos de Newton e admirava os trabalhos de Benjamin Franklin, desenvolveu seu interesse pelos fenômenos elétricos e magnéticos após trabalhar com um curioso cristal que atraia cinzas quando eletrificado, a turmalina. Sua visão teórica pautava-se em raciocínio analógico entre fenômenos elétricos e magnéticos. Em 10 de Maio de 1757, Aepinus se mudou para São Petersburgo, Em 1759, Aepinus publicou sua mais importante obra sobre o magnetismo e a eletricidade, o livro *Tentamen Theoriae Electricitatis et Magnetismi*. Apesar dos experimentos serem majoritariamente genuínos, o trabalho de Aepinus é um exemplo do que hoje se enxerga como física matemática. Um exemplo de seu uso da matemática como argumento pode ser visto quando considera a interação elétrica de dois corpos, A e B, não eletrificados. Ele escreve a seguinte equação: a-r+A+x=0. Onde 'a' representa a força da matéria ordinária de A no fluido elétrico de B, 'r' é a força entre os fluidos elétricos, 'A' é a força entre o fluido de A e a matéria ordinária de B e 'x' é a força entre as matérias ordinárias. Como os corpos não estão eletrificados, então a-r=0. Assim tem-se que A=-x. As conclusões físicas abstraídas por Aepinus são bastante importantes (i) atração e repulsão seguem a mesma lei de distância e (ii) 'x' é repulsiva, corrigindo assim inconsistências na proposta de Franklin para as forças elétricas. (1) Dos trabalhos de Aepinus chegamos às pesquisas de Coulomb (1736-1802), de 1785. Quando ele estudou experimentalmente a lei do inverso do quadrado. Seus experimentos eram (e são) muito difíceis de replicar, o que gerou um forte debate na época. Até metade do século XIX, porém, o assunto já estaria pacificado. Esses acontecimentos construíram as bases para a eletricidade, influenciando pesquisas posteriores no mesmo assunto, e modelando o estilo de fazer física já nos séculos XIX e XX. (2)

Palavras-chave: História da eletricidade. Século XVIII. Matematização

Referências:

1 AEPINUS, F. U. T. **Aepinus's essay on the theory of electricity and magnetism**. Princeton: Princeton University Press, 1979.

2 HEERING, P. On Coulomb's inverse square law. **American Journal of Physics**, v. 60, n. 11, p. 988-994, 1992.

PG115

Dynamics of a j=3/2 quantum spin liquid

NATORI, W. M. H.[1]; DAGHOFER, M.[2]; PEREIRA, R. G.[3]

wmhnatori@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Institut für Funktionelle Materie und Quantentechnologien. Universität Stuttgart

[3] Instituiuto de Física - UFRN

Mott insulators with strong spin-orbit coupling (SOC) display unusual magnetism induced by anisotropic and bond-dependent pseudospin interactions. These materials became the focus of intense research since the discovery that Kitaev model could be a good starting point to describe the magnetism of $4d^5$ and $5d^5$ Mott insulators in specific geometrical conditions. Such compounds are generically called Kitaev materials. Their proposal was a remarkably important, since Kitaev model is exactly solvable and its ground state is a Majorana quantum spin liquid. Unfortunately, none of them were shown to display a quantum spin liquid ground state until now. Despite this negative result, the manifold of phases found in Kitaev materials has demonstrated that strongly correlated systems with strong SOC stabilize exotic magnetic states. This general result is expected to be valid in other compounds with similar single-ion physics. In this context, heavy-element Mott insulators arranged in the ordered double perovskites (ODP) structure are particularly interesting because both their geometrical arrangement and their interactions are frustrated. In this talk, I will discuss a Kugel-Khomskii model for $4d^1$ and $5d^1$ Mott insulators in ODPs and a Majorana chiral spin-orbital liquid state proposed as a possible ground state. (1) This model is conveniently written in terms of pseudospin and pseudo-orbital operators representing multipoles of the effective j=3/2 angular momentum. Thermodynamic and spectroscopic properties of the chiral spin-orbital liquid are characterized within parton mean-field theory and compared with the experimental data for the spin liquid candidate Ba2YMoO6. (2) We also discuss the operators involved in resonant inelastic X-ray scattering (RIXS) amplitudes for d^1 ODP compounds and calculate the expected cross sections for the chiral spin-orbital liquid. We show that RIXS can be used to selectively probe pseudospin and pseudo-orbital degrees of freedom.

Palavras-chave: Quantum spin liquids. Quantum compass models. Strong spin-orbit coupling.

Referências:

1 NATORI, W. M. H.; et al. Chiral spin-orbital liquid with nodal lines. **Physical Review Letters, v.**117, p.017204,2016.doi:10.1103/PhysRevLett.117.017204.

2 NATORI, W. M. H.; DAGHOFER , M. ; PEREIRA, R. G. **Dynamics of a j=3/2 quantum spin liquid**. Disponivel em: <arXiv:1794.06134>. Acesso em: 30 ago. 2017.

PG116

Teoria de laser de estados não coerentes

OLIVEIRA NETO, F. de[1]; MOUSSA, M. H. Y.[1]

foliveiraneto@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Existem diversos estados diferentes para a o campo eletromagnético (EM), conhecemos o estado de luz proveniente de um laser, sua distribuição na base de Fock corresponde ao Estado Coerente, como a teoria prediz. Neste trabalho fazemos uso da teoria do laser juntamente com teoria de engenharia de reservatório e proteção de estados para que, a partir dos processos guiados pela teoria de laser convencional, possamos obter diferentes estados do campo EM, oriundos do estado estacionário do laser. (1-2) A partir de um modelo de esquema de níveis de Jaynes Cummings (JC) e Anti Jaynes Cummigs (AJC) foi possível verificar que o estado do campo EM obtido é um Estado Comprimido. Utilizando um modelo de cavidade de vários modos interagentes, via espelhos semi-transparentes ou fibra óptica, verificamos a obtenção de um estado emaranhado proveniente de uma fonte contínua. Ainda estudamos um modelo de duas amostras, para a obtenção de Estados de Gato, fazendo uso da não linearidade do Hamiltoniano do meio Kerr. (3) Destaca-se também uma extensão do projeto, uma vez que os resultados apontam para uma nova técnica de proteção de estados, utilizando o estado estacionário do laser como protetor do estado desejado.

Palavras-chave: Teoria do laser. Óptica quântica. Eletrodinâmica quântica.

Referências:

1 ORSZAG, M. **Quantum optics**: including noise reduction, trapped ions, quantum trajectories, and decoherence. Berlin: Springer, 2007.

2 CARVALHO, A. R. R. et al. Decoherence, pointer engineering, and quantum state protection. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 22, p. 4988-4991, 2001.

3 LU, D.-M.; ZHENG, S.-B. Scheme for realizing Kerr nonlinearity in cavity QED. **Chinese Physics Letters**, v. 24, n. 6, p. 1567-1569, 2007.

PG117

Monte Carlo recursivo para o cálculo de energia livre de ligação em sistemas biológicos

NOGUEIRA, V. H. R.[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]

victor.nogueira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os sistemas biológicos macromoleculares são sistemas conhecidos por serem sistemas interagentes. Por exemplo, a fim de exercer sua função, um hormônio precisa atingir um receptor específico no ambiente intracelular. Para realizar uma catálise necessária à homeostase, uma enzima precisa se associar a seu substrato de forma transiente. A regulação da transcrição gênica está intimamente associada à capacidade do DNA de recrutar complexos proteicos que interagem em porções específicas do ácido nucleico. (1) As interações de alta especificidade são tipicamente caracterizadas pelo reconhecimento de alta *afinidade* que um componente do sistema tem por outro. A grandeza termodinâmica diretamente associada à afinidade é a variação da energia livre associada à interação, ΔG_{lig} = -RT ln K_a c_{conc}, onde R é a constante dos gases ideais, K_a é a constante de afinidade e c_{conc} = 1 mol.L^{-1} é uma constante para correção da unidade. Entretanto, embora ensaios laboratoriais sejam feitos rotineiramente para obtenção dessas grandezas, a estimativa computacional ainda é um grande desafio. (2) Para as biomoléculas, assumindo que todas as interações microscópicas são conhecidas, os métodos de simulação baseados em dinâmica molecular (DM) ou Monte Carlo (MC) podem ser aplicados. Contudo, o gasto computacional e o tempo para realizar estas avaliações, aumentam exponencialmente à medida que o número de átomos e dos graus de liberdade do sistema crescem. A dificuldade em calcular a energia livre está diretamente relacionada com a complexidade da formulação de mecânica estatística para um sistema de muitos corpos, no qual a o espaço de fase total envolve um grande número (aumenta exponencialmente) de estados acessíveis, dos quais as propriedades termodinâmicas, a estrutura e a amostragem do sistema são determinadas. O presente trabalho trata-se de uma nova abordagem, já testada para sistemas simples, porém, nunca aplicada a sistemas biológicos, que preserva o rigor termodinâmico e com custo computacional reduzido para o cálculo da energia livre de interação, através do método de Monte Carlo Recursivo. (3) Os parâmetros e modelos que serão utilizados estão em teste através do programa *McLiBELa* – desenvolvido no grupo de Biotecnologia Molecular – que tem gerado resultados interessantes para o cálculo das energias de interação para sistemas com dados já conhecidos, como o da lisozima L99A/M102Q do vírus T4, Após a validação dessa nova abordagem, o método será adicionado ao programa e espera-se que essa nova ferramenta seja usada para cálculos das energias livres de interação de sistemas mais complexos e de maior aplicação em biotecnologia.

Palavras-chave: Monte Carlo recursivo. Energia livre de ligação. Interações moleculares.

Referências:

1 NELSON, D. L.; COX, M. M. **Princípios de bioquímica de Lehninger**. 5. ed. Porto Alegre: Artmed, 2010.

2 LEACH, A. R. **Molecular modelling:** principles and applications. 2nd ed. Harlow: Prentice Hall, 2001.

3 LI, Z.; SCHERAGA, H. A. Monte Carlo recursion evaluation of free energy. **Journal of Physical Chemistry**, v. 92, n. 9, p. 2633-2636, 1988.

PG118

Aproximantes de Padé e a Série Perturbativa da QCD nos decaimentos do Tau em Hádrons.

OLIANI, F. H.[1]; BOITO, D. R.[1]

fabio.oliani@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os decaimentos do Tau em hádrons é um dos processos mais limpos para o estudo de Cromodinâmica Quântica (QCD) perturbativa. Combinando a descrição teórica de $\tau \rightarrow hadrons + \nu_\tau$ com dados experimentais, é possível o acoplamento forte, α_s, com boa precisão. (1) Neste trabalho nós usamos os Aproximantes de Padé (PAs) (2) para extrair informação sobre a série perturbativa em ordens altas, visando reduzir a incerteza teórica associada ao truncamento da série. A série perturbativa, conhecida até o termo α_s^4 (3), no presente momento, é, no melhor, uma expansão asintótica e pode ser melhor entendida através da sua transformada de Borel. Essa transformada têm singularidades no eixo real (conhecidas como renormalons). PAs tem a habilidade de aproximar funções que contém singularidades deste tipo. Nós usamos PAs para reconstruir a transformada de Borel da série obtida no limite de grande número de sabores, conhecido como limite large-N_f. Neste limite, a séries perturbativa é conhecida em todas as ordens de α_s, e é possível compararmos os resultados obtidos com os PAs e o resultado exato. É, então, um bom laboratório para o uso de PAs, antes da aplicação ao caso da QCD completa. Vamos mostrar que podemos predizer coeficientes de ordens mais altas da série, sua integral de Borel, a localização dos pólos renormalons e o comportamento da série em ordens altas. Finalmente, vamos discutir como o uso de esquemas de renormalição menos perturbativos melhoram os resultados do método.

Palavras-chave: QCD. Aproximantes de Padé. Tau. Transformada de Borel.

Referências:

1 BOITO< D. et al.Strong coupling from the revised ALEPH data for hadronic tau decays.**Physical Review D**, v.91, p.034003,2015.doi:10.1103/PhysRevD.91.034003.

2 BAKER, G. A.**Essentials of Padé approximants**. New York: Academic Press, 1975.

3 BAIKOV, P. A.; CHETYRKIN, K. G.; KUHN, J. H.Order alphs_s^4 QCD corrections to Z and tau decays. **Physical Review Letters**, v.101, n.1, p.012002, 2008.

PG119

Estudos estruturais e caracterização por fragmentos na descoberta de novos agroquímicos

OLIVEIRA, A. A.[1]; GUIDO, R. V. C.[1]; OLIVA, G.[1]; BUENO, R. V.[1]; LIMA, G. M. A.[1]; MALUF, F. V.[1]

andrew@ursa.ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Derivados da cana-de-açúcar atualmente são os maiores contribuidores para as fontes renováveis na produção de energia. Entretanto, as ocorrências de doenças severas afetam negativamente a produtividade canavieira. Um destes fatores é a escaldadura das folhas, a qual é causada pela bactéria gram-negativa *Xanthomonas albilineans*. A fitodoença afeta diretamente a produção da cana-de-açúcar, reduzindo a qualidade do caldo extraído e obrigando a reforma precoce da cultura. Atualmente, não existem processos químicos ou biológicos para o controle do patógeno, e desta maneira, criam-se oportunidades para a descoberta e desenvolvimento de moléculas inibidoras da bactéria *X. albilineans*. (1) Neste sentido, selecionamos uma via clássica e validada na busca e desenvolvimento de novos inibidores: a via dos folatos. Especificamente, a enzima Diidropteroato sintase (DHPS) (E.C. 2.5.1.15) é essencial para a formação do ácido fólico através da transferência do ácido 4-aminobenzóico (pABA) ao 7,8-diidropterina pirofosfato (DHPP), formando o diidropteroato (DHP) e liberando pirofosfato em mecanismo S_n1. Brevemente, a enzima DHPS de *X. albilineans* (XaDHPS) foi clonada no vetor pET-Trx e recombinantemente expressa em células de *E. coli* BL21(DE3) Rosetta 2. Etapas de purificação em alto rendimento, cristalização por difusão de vapor, seeding e soaking em soluções concentradas de ligante foram feitas anteriormente à difração de raios X. Os ligantes foram identificados por fluorimetria de varredura diferencial (DSF), e confirmados pelas suas respectivas afinidades por termoforese em microescada (MST). Todos os cristais formados são monoclínicos e grupo espacial: C 1 2 1. A estrutura na forma apoenzima foi determinada à 1.8 Å de resolução (PDB ID 5ULQ), enquanto que em complexo com o substrato pABA (PDB ID 5UUR) e produto (PDB ID 5V20) fornecem detalhes do cenário catalítico na formação do diidropteroato. (2) Da mesma maneira, identificamos o modo de ligação de dois fragmentos, derivados de piridina e indol, que aparecem em posições diferentes na proteína, e assim, concatenamos para a evolução de uma nova molécula baseada na estrutura do fragmento (FBDD) e do alvo molecular (SBDD). Surpreendentemente, os fragmentos também aparecem na interface dimérica, como o substrato pABA, o que abre a possibilidade de explorarmos um sítio alostérico no desenvolvimento de novos inibidores. (3) Por fim, o entendimento e visualização de distintos estados da enzima XaDHPS nos auxilia no planejamento de novas moléculas, que sejam seletivas e específicas, no combate ou tratamento da escaldadura das folhas.

Palavras-chave: DHPS. Cana-de-açúcar. Xanthomonas albilineans.

Referências:

1 ROTT, P. et al. Unravelling pathogenicity of Xanthomonas albilineans, the causal agent of sugarcane leaf scald. **Proceedings International Society Sugar Cane Technology,** v. 27, p. 1-11, 2010.

Disponível em: <https://agritrop.cirad.fr/554622/1/document_554622.pdf>. Acesso em: 31 ago. 2017.

2 PROTEIN DATA BANK (PDB). Disponível em: <http://www.rcsb.org/>.

3 HAMMOUDEH, D. I. et al. Identification and characterization of an allosteric inhibitory site on dihydropteroate synthase. **ACS Chemical Biology**, v. 9,da n. 6, p.1294-1302, 2014.

PG120

Desenvolvimento de ferramenta computacional para obtenção automatizada de dados em testes comportamentais do tipo campo aberto

OLIVEIRA, I. M.[1]; PAIVA, F. F.[1]

bodelha@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Testes comportamentais em animais são utilizados quando se deseja observar comparativamente alguma característica, tal como a conduta ou deslocamento sob efeito de algum fármaco e sem administração do mesmo (1), identificação de perfis comportamentais de linhagens diferentes dentro de uma mesma espécie (2), ou ainda de uma mesma linhagem, em condições ambientais ou fisiológicas (3) diferentes. Pela simplicidade de construção, o Teste de Campo Aberto (*Open Field Test*) foi o escolhido para o projeto. O teste consiste em se soltar o roedor, ou algum outro animal de pequeno porte, numa caixa com quadrantes desenhados e observar, dentre outros fatores, a distância percorrida, velocidade média, número de elevações, número e duração de "paradas", frequência nos quadrantes centrais, número de coprólitos. Normalmente os testes tem duração de 5 a 15 minutos, e são gravados em vídeo, para posteriormente serem assistidos e analisados, um a um, pelo pesquisador que fará anotações dos elementos citados. Esse processo, não só é extremamente pouco eficiente como altamente passível de falhas. O objetivo central do projeto consiste em desenvolver uma ferramenta computacional que faça, a partir dos vídeos obtidos em testes de Campo Aberto, uma extração automatizada de dados quantitativos que subsidiarão a análise qualitativa final do comportamento animal. Para tanto, utilizar-se-á estratégias típicas no campo da Visão Computacional, como segmentação por intensidade ou textura, para se detectar a posição do animal na caixa, bem como de extração de características que podem permitir a classificação dos comportamentos possíveis. Atualmente tem-se investigado variações de técnicas e de parâmetros dentro das mesmas, visando robustez, fundamental à aplicabilidade da ferramenta.

Palavras-chave: Teste de campo aberto. Atividade locomotora. Visão computacional.

Referências:

1 CHOLERIS,E. et al. A detailed ethological analysis of the mouse open field test: effects of diazepam, chlordiazepoxide and an extremely low frequency pulsed magnetic field. **Neuroscience & Biobehavioral Reviews**,v.25, n. 3, p.235-260,2001, .

2 CAROLA,V. et al.Evaluation of the elevated plus-maze and open-field tests for the assessment of anxiety-related behaviour in inbred mice. **Behavioural Brain Research**, v.134, n. 1, p. 49-57,2002.

3 VALENTINUZZI, V. S. et al. Locomotor response to an open field during C57BL/6J active and inactive phases. **Physiology & Behavior**, v. 69, n.3, p. 269-275,2000.

PG121

Photonic decontamination of circulating fluids

OLIVEIRA, B. P. de[1]; BLANCO, K. C.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

b.p.oliveira@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Numbers of patents applied to develop the chemical agents with focus in industry increase exponential, this fact is associated with politics aspect employed by FAO for decrease an application the chemical during the manufacture foods, because is necessary a higher concentration to grantee a security foods, the value is around 80 ppm of the chemistry, frequently utilize a hydroxide of sodium, hiperacetic, hypochlorite. (1-2) However, it is known that UV light is a great photonic germicidal, which apply to decontaminate and/or sterilization a fluids or materials. Nowadays in the food industry has a reception that insert the foods to blanching process (charging water); (3) This is make by tubes that direction the water together with food to blanching process and normally the flow is around 10 – 30 L/s, because this, create a technical and scientific problem, by cause of the current geometry that not support a hard situation in this step. The present work create a new and a specific geometry that have possible apply directly in the charging water independent of the industry, the preliminary results show that a decrease of the microorganism concentrations present in the water and the possibility of the leaching of foods (for example broccoli). Finally the present research pretends make a math equation and characterization of the prototype in some conditions to create a base equation for dimensional the optical part and unit operation, for apply an anywhere food industry.

Palavras-chave: Decontamination. Food industry. UV.

Referências:

1 ANTLE, J. M. Efficient food safety regulation in the food manufacturing sector. **American Journal of Agricultural Economics**, v. 78, n. 5, p. 1242-1247, 1996.

2 PLECHKOVA, N. V.; SEDDON, K. R. Applications of ionic liquids in the chemical industry. **Chemical Society Reviews**, v. 37, n. 1, p. 123-150, 2008.

3 FRAISE, A. P.; LAMBERT, P. A.; MAILLARD, J.-Y. (Ed.). **Russell, Hugo and Ayliffe's principles and practice of disinfection, preservation and sterilization**. 4th ed. Oxford, UK.: Blackwell Publishing Ltd., 2004.

PG122

Estrutura Cristalográfica da proteína NS5 do Zika Virus domínio RNA polimerase dependente de RNA

OLIVEIRA, K. I. Z. de[1]; GODOY, A. S.[1]; LIMA, G. M. A.[1]; TORRES, N. U.[1,2]; MALUF, F. V.[1,2]; GUIDO, R. V. C.[1]; OLIVA, G.[1]

ketzagato@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Cellco Biotec

O Zika vírus (ZIKV) pertence à família *Flaviridae* e ficou conhecido por causar a Febre Zika (FZ), cujo principal vetor de transmissão é o mosquito *Aedes aegypti*. Dentre dezembro de 2015 a maio de 2017, mais de 200.000 casos de FZ foram confirmados em território brasileiro. Além de causar sintomas simulares aos da Dengue, a FZ foi relacionada ao aumento dos casos de microcefalia em recém-nascidos cujas mães tiveram infecções durante a gestação. Além disso, mesmo bebês que nasceram sem apresentar o fenótipo da doença podem vir a desenvolver outros tipos de problemas de neurológicos, motores, de visão e/ou de coração. Esse conjunto de sintomas foi nomeado de Síndrome Congênita do Zika vírus. O ZIKV possui um genoma de RNA positivo que é traduzido como uma única poliproteína e, então, clivado em três proteínas estruturais e sete proteínas não estruturais (NS).(1) A proteína NS5 do ZIKV é a maior e mais conservada proteína não estrutural. Possui dois domínios, um Metil-transferase e outro RNA polimerase dependente de RNA (RdRp), responsável pela polimerização de RNA necessário para a replicação de RNA viral. (2) Nosso objetivo até o momento projeto foi estudar especificamente a proteína não-estrutural NS5 domínio RdRp, por meio da cristalografia e subsequentemente utilizá-la como alvo para desenvolvimento de ligantes específicos. Para isso realizamos a sub-clonagem da sequência codificante dessa proteína em um vetor de expressão, e a produção em larga em um sistema heterólogo. Realizamos também a purificação da proteína por cromatografia de afinidade e cromatografia de exclusão molecular por tamanho. Em seguida, realizamos a cristalização da proteína utilizando o robô Crystal Gryphon LCP, obtendo assim diversos cristais no kit Morpheus HT- 96 (Molecular Dimensions). Esses cristais foram submetidos a difração de raio X, na linha MX2 do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), onde obteve-se um conjunto completo de dados a uma resolução de 1,9 Å. Esse conjunto de dados permitiu a resolução da estrutura do domínio RdRp da NS5 de ZIKV por substituição molecular, fazendo uso de vários programas computacionais. Ao final do refinamento foi possível verificar um conjunto com 99.7% de completeza, alta multiplicidade e resolução. O modelo final apresentou uma boa estereoquímica, com cerca de 98,3% de resíduos em regiões favoráveis no diagrama de Ramachandran e nenhum localizado em regiões não permitidas. O refinamento da estrutura deu-se até os valores estatísticos de $R_{\mathrm{work}}/R_{\mathrm{free}}$ de 0.20/0.17. O modelo final da estrutura da NS5-RdRp se assemelha a forma de uma mão direita, contendo três principais subdomínios: os dedos, a palma e polegar, além da presença de dois íons estruturais de Zn^{2+}. Apesar da similaridade com outros modelos já descritos, como o de Dengue, nossa estrutura revelou diferenças importantes em importantes sítios considerados alvos para o desenvolvimento de candidatos antivirais, como o *priming loop*.(3) Nossos resultados abriram caminho para busca e desenvolvimento de candidatos à medicamentos antivirais contra o ZIKV, além de

permitir a aplicação de métodos de design de fármaco baseados em estrutura (SBDD) com a biblioteca de compostos naturais e sintéticos do CIBFar.

Palavras-chave: ZIKA. RdRp. Crystalografia.

Referências:

1 SHAN, C. et al. An infectious cDNA clone of Zika virus to study viral virulence, mosquito transmission, and antiviralIInhibitors. **Cell Host Microbeell Host Microbe**, v. 19**,** n.6, p.891–900,2016.

2 YOKOKAWA, F. et al. Discovery of potent non-nucleoside iInhibitors of dengue viral RNA- dependent RNA polymerase from a fragment hit using structure- based drug design.**Journal of Medicinal Chemistry**, v.59, n.8, p.3935-52,2016. doi:10.1021/acs.jmedchem.6b00143.

3 GODOY, A. S. et al. Crystal structure of Zika virus NS5 RNA-dependent RNA polymerase. **Nature Communications**, **v.8,** p.14764,2017.doi:10.1038/ncomms14764.

PG123

A new computational approach to investigate digital porous media by NMR

OLIVEIRA, E. L.[1]; FERREIRA, A. G. A.[1]; TREVIZAN, W.[2]; BONAGAMBA, T. J.[1]

everton.lucas.oliveira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Centro de Pesquisa Da Petrobas - CENPES

Over the past two decades, with the advent of Exchange NMR techniques, it became necessary to correlate the observed NMR results with material microstructure and composition. (1) X-ray computed microtomography (microCT) is a useful tool to complement the NMR analysis and shows precise information about the morphology. (2) Furthermore, the advancement of Computational Methods Applied in Digital Porous Media (DPM) allows an extensive study of the petrophysical properties of rocks. In this work, we use the Random Walk Method – classic example of Monte Carlo – to reproduce the physical effects from diffusion in DPM and propose a new computational method for the NMR properties. Comparing with a Standard Method developed by Bergmann et al. (3), we show an improvement in the correlation between NMR relaxation times and pore size distribution from the simulated data. As demonstrated in this work, the measurement of relaxation times in simple geometrical shapes is in good agreement with previous determinations by Brownstein and Tarr. Additionally, classic and sophisticated NMR experiments can be reproduced by the developed software in DPM obtained by microCT. The obtained results, in good agreement with the standard models, indicate the potential of computational physics in the analyses of NMR in complex porous materials.

Palavras-chave: NMR. Digital porous media. T2 locality.

Referências:

1 SONG, Y.-Q. Magnetic resonance of porous media (MRPM): a perspective. **Journal of Magnetic Resonance,** v. 229, p. 12-24, 2013. doi:10.1016/j.jmr.2012.11.010

2 JARZYNA, J A., et al. X-ray computed microtomography—a useful tool for petrophysical properties determination. **Computational Geosciences**, v. 20, n.5, p.1155-1167, 2016.

3 BERGMAN, D. J. et al. Self-diffusion in a periodic porous medium: a comparison of different approaches. **Physical Review E**, v. 51, n. 4, p. 3393, 1995.

PG124

Combined cellulose and quaternized chitosan films for tissue engineering

ONO, B. A.[1]; JOHNS, M. A.[2]; COURTENAY, J. C.[2]; SANTOS, D. M.[3]; BUKZEM, A. de L.[3]; CAMAPANA FILHO, S. P.[3]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]; RAM, S.[2]; SCOTT, J. L.[2]

bruno.ono@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Centre for Sustainable Chemical Technologies - University of Bath

[3] Instituto de Química de São Carlos - USP

The technology to develop tissues ex vivo has been growing in recent years. (1) Different approaches have been applied so far to develop new tissue scaffolds, which have properties to promote cell attachment and cell spreading. The use of growth factors in tissue engineering is expensive (2) and complicated manufacture. Here we present the combination of two biopolymers, cellulose and modified (quaternized) chitosan, to develop a hydrogel that promotes cell attachment without the use of growth factors. These materials have the advantage of coming from a renewable source. The combination of the biopolymers combines two key elements: 1. the mechanical properties of the cellulose material, and 2. the positive charge of the modified (quaternized) chitosan. A range of materials based on cellulose films cast from organic electrolyte solutions (ionic liquid combined with dipolar aprotic solvents) were produced by phase inversion using anti-solvent solutions of quaternized chitosan. Free softwares (ImageJ and Python) were used to develop programmes to analyse the data images. The materials were characterized using NMR, confocal microscopy, FT-IR, zeta potential and cell studies conducted at Bath University. The inclusion of quaternized chitosan yielded materials that exhibited an increase of the cell attachment reflected the increased surface positive charge. Also, the same material presented better cell spreading response (low circularity coefficient) and does not presented cytotoxicity through MTT test. This new material has great potential for commercial use since the materials are natural, renewable, not expensive and very abundant. (3)

Palavras-chave: Quaternized chitosan. Cellulose. Tissue engineering. Biopolymers. Free software.

Referências:

1 DAVIES, J. A.; CACHAT, E.Synthetic biology meets tissue engineering. **Biochemical. Society Transactions,** v.. 44, n 3, p. 696–701, 2016.

2 BACAKOVA, E. et al.Cell adhesion on artificial materials for tissue engineering. **Physiological Research,** v. 53, Suppl. 1, p. S35-45, 2004.

3 NATIONAL RESEARCH COUNCIL. **Biobased industrial products.** Washington, D.C.: National

Academies Press, 2000.

PG125

Estudos no diamante para aplicações em tecnologias quânticas

ONCEBAY, C.[1]; ALMEIDA, J. M. P. de[1]; MENDONÇA, C. R.[1]; ACOSTA, V.[2]; MUNIZ, S. R.[1]

charlieoncebay@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] University of New Mexico - UNM

Estudos de materiais geralmente implicam estudos de defeitos, já que estes estão intimamente relacionados às propriedades dos materiais. Portanto, uma boa compreensão dos fenômenos de defeito é fundamental no controle das propriedades dos materiais. O diamante tem surgido recentemente como uma plataforma promissora para circuitos fotônicos integrados ou circuitos óptico integrados (1-2), combinando propriedades não lineares como o índice de refração não linear, além disso, o diamante também oferece excelentes propriedades térmicas (alta condutividade térmica, por exemplo) que permite a manipulação a potências altas. Uma aplicação interessante situa-se no campo da óptica quântica: não linearidade de diamantes pode permitir a translação de frequência, para o intervalo de comprimento da onda de telecomunicações por exemplo. (3) No presente trabalho abordamos a obtenção e a caracterização dos centros NVs an SiVs em diamante, observando suas propriedades ópticas lineares, não lineares (n_2) e espectroscópicas para otimizar seu uso em magnetometria e outras aplicações tecnológicas. Além disso, se desenhará e construirá o equipamento para caracterização e manipulação de estados quânticos nesses sistemas.

Palavras-chave: Centro nitrogênio vacância. Microscópio confocal. Centro silício vacância.

Referências:

1 FARON, A. C. et al. Quantum photonic devices in single crystal diamond. **New Journal of Physics**, v. 15, p. 025010-1-025010-9, Feb. 2013. doi:10.1088/1367-2630/15/2/025010.

2 MAZE, J. R. et al. Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond. **Nature**, v. 455, n. 7213, p. 644-647, 2008.

3 HAUSMANN, B. J. M. et al. Diamond nonlinear photonics. **Nature Photonics**, v. 8, n. 5, p. 369-374, 2014.

PG126

Informação quântica e relatividade

OTA, I. N. N.[1]; VANZELLA, D. A. T.[1]

iaraota@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A Teoria Quântica de Campos em Espaços Curvos (TQCEC) faz previsões do comportamento de fenômenos quânticos sob um campo gravitacional clássico, descrito pela teoria de Relatividade Geral (RG). Até o momento, não há previsões experimentais que desqualificam a RG, entretanto, algumas considerações teóricas levam a crer que a RG é válida apenas em escalas macroscópicas, onde as escalas de espaço e tempo são maiores que as escalas de Planck. Como ainda não foi desenvolvida uma teoria de gravitação quântica satisfatória, a TQCEC é uma boa aproximação para previsões de fenômenos quânticos sob efeitos gravitacionais, como a aproximação semiclássica da teoria eletromagnética um dia obteve resultados em completo acordo com a eletrodinâmica quântica. (1) Esse trabalho tem como objetivo final o estudo da teoria de Informação Quântica em referenciais não-inerciais e a TQCEC é uma ferramenta fundamental para tal realização. Como fase inicial, a revisão bibliográfica da TQCEC está sendo realizada e aqui serão apresentados dois fenômenos previsto pela teoria: a criação de partículas em um espaço-tempo cosmológico, onde considera-se uma evolução temporal (expansão) das componentes espaciais da métrica, e a criação de partículas em referenciais acelerados (Efeito Unruh).

Palavras-chave: Teoria quântica de campos em espaços curvos. Efeito Unruh.

Referências:

1 BIRRELL, N. D.; DAVIES, P. C. W. **Quantum fields in curved space**. Cambridge: Cambridge University Press, 1982.

PG127

Molecular dynamics simulation and FEP+ calculations for a series of solchicine binding site modulators of tubulin

PALOMINO-SALCEDO, D. L.[1]; MAGALHÃES, L. G.[1]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

palomino@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Microtubules, a component of the cytoskeleton, are polymers of α/β tubulin involved in cell replication. (1) Recent studies show that microtubules are an effective target for cancer chemotherapy. However, α and β human tubulin have six and seven isotypes, respectively, with an identity around of 95%. The most important differences between those isotypes are mutations in the paclitaxel, vinblastine and colchicine binding sites (2), which can lead to resistance to major chemotherapy agents. In this study, we have investigated binding affinity and binding energy of a set of fifteen podophyllotoxin-like molecules (3) in the colchicine binding site of the tubulin-isotypes βII (present in all kind of human cells), using molecular dynamics simularions and FEP+. These ligands possess anti-polymerization activity of tubulin in-vitro and one have different cytotoxicity activity on over-expressed tubulin βII/βIII cells. The results will help us in the design of new drug candidates for the treatment of cancer.

Palavras-chave: Microtubules. Molecular dynamics simularions. Cancer.

Referências:

1 MASSAROTTI, A. et al. The tubulin colchicine domain: a molecular modeling perspective. **ChemMedChem**, v. 7. n. 1, p. 33-42, 2012.

2 RAVANBAKHSH, S. et al. Determination of the optimal tubulin isotype target as a method for the development of individualized cancer chemotherapy.**Theoretical Biology and Medical Modelling**, v. 10, p. 29-1-29-18, 2013.

3 MAGALHÃES, L. G. et al. Discovery of a series of acridinones as mechanism-based tubulin assembly inhibitors with anticancer activity. **PloS One**, v. 11, n. 8, p. e0160842-1-e0160842-17, 2016.

PG128

Production and trapping of $\nu = 0$ ultracold molecules by a high- power light beam

PASSAGEM, H. F.[1]; MARCASSA, L. G.[1]

henry.passagem@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Photoassociation of a pair of ultracold atoms is a quite simple and rapid approach for cold molecule formation. It relies on the absorption of a single photon, mostly at large internuclear distance in a classical view, towards an excited electronic molecular state followed by radiative relaxation down to the electronic ground state. The main limitation of PA is that the latter step is incoherent, so that the population of the created molecules is spread over many vibrational levels with weak or moderate binding energies. If the excited electronic molecular state exhibits a peculiar feature at short internuclear distance like a potential barrier or an avoided crossing, the population of deeply-bound ground state levels may be significantly enhanced. (1) Then optical pumping may be used to produce $\nu = 0$ ground ultracold molecules. (2) In this work, the influence of a high-power fiber laser on the formation and trapping of ultracold $^{85}Rb_2$ molecules is investigated in a magneto optical trap. We found evidence for the formation of ground state $^{85}Rb_2$ molecules in $\nu = 0$ with a maximal rate of 10^4 s^{-1}, induced by short-range photoassociation by the fiber laser followed by optical pumping. This work may have important consequences for molecular optical dipole traps using lasers around the conventional 1064 nm wavelength.

Palavras-chave: Photoassociation. Ultracold molecules. Dipole trap. Optical pumping.

Referências:

1 PASSAGEM, H. F. et al. Formation of ultracold molecules induced by a high-power single-frequency fiber laser. **Journal of Physics B**: atomic, molecular and optical physics, v. 50, n. 4, p. 045202-1-045202-6, Feb. 2017.

2 VITEAU, M. et al. Optical pumping and vibrational cooling of molecules. **Science**, v. 321, p. 232-234, July 2008. doi: 10.1126/science.1159496.

PG129

Estudo da dinâmica, interação e internalização do fotossensibilizador Curcumina em cultura planctônica das bactérias pré – induzido por luz.

PINTO JUNIOR, F. F.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]

fabiojr@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Ao longo dos últimos anos a Terapia Fotodinâmica vem se destacando como uma excelente ferramenta no controle de microrganismos, além do combate à alguns tipos de câncer como o melanoma. Frente ao desafio de combater esta doença e aprimorar a compreensão do controle microbiológico a Terapia Fotodinâmica (PDT do inglês *Photodynamic Therapy*) tem se consolidado cada vez mais como um método eficaz, de relativo baixo custo e de fácil condução, aplicação e manutenção do tratamento de combate ao câncer. (1) O PDT consiste basicamente na aplicação de um composto Fotossensibilizador (PS do inglês *photosensitizer*) e de uma fonte de luz com um comprimento específico de onda, que ao irradiar as células que contém o PS o ativará e fará com que ocorra certas reações que darão origem ao oxigênio singleto. Sendo este oxigênio uma forma altamente citotóxica para a célula dar – se – à sua apoptose. Em vista disso, justifica – se o estudo detalhado e profundo da dinâmica, da interação e da internalização do PS induzido por luz. (2) Então, como PS escolhemos a Curcumina. Um composto fotoquímico natural obtido dos rizomas da *Curcuma longa* e com vasta capacidade antimicrobiana, anti – inflamatória, antitumorais e antiangiogênica. Possui uma grande janela de absorção que varia de 300 nm a 500 nm, mas no seu pico de absorção, 425 nm, torna-se um potente PS. (3) Na busca da obtenção de um coeficiente de difusão da Curcumina em cultura planctônica este trabalho utiliza-se de técnicas ópticas para que, em nível microscópico, se determine as concentrações de bactérias, doses ideais de luz e de PS entregues às células. Resultados iniciais em curvas de crescimento ao longo do tempo tem mostrado uma eficiente interação da Curcumina tanto com as bactérias gram-positivas, ***Staphylococcus aureus e Streptococcus mutans,*** quanto com a gram-negativa, ***Escherichia coli***. Acreditamos que com esses resultados possamos estabelecer protocolos específicos para estudos futuros e uma maior compreensão dessa interação entre o PS e o organismo.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Fotossensibilizador. Curcumina.

Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Terapia fotodinâmica dermatológica**: programa TFD Brasil. São Carlos: Compacta Gráfica e Editora, 2015. 313 p.

2 WILSON, B.C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. 61-109, 2004

3 SHLAR, I.; DROBY, S.; RODOV, V. Modes of antibacterial action of curcumin under dark and

light conditions: a toxicoproteomics approach. **Journal of Proteomics**, v. 160, p. 8-20, 2017. doi.org/10.1016/j.jprot.2017.03.008.

PG130

PyMR : um framework para programação de sistemas de ressonância magnética

PIZETTA, D. C.[1]; SILVA, L. de C. R. da[2]; SOUZA, P. V. B. D. de[1]; FALVO, M.[1]; COELHO, F. B.[1]; VIDOTO, E. L. G.[1]; MARTINS, M.[1]; TANNÚS, A.[1]

daniel.pizetta@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

A Ressonância Magnética (RM) esteve sempre à frente das ferramentas de análise e diagnóstico por suas características não-invasiva e não-destrutiva do objeto em estudo. Recentes pesquisas em diversas áreas, como a de agronomia, estão trazendo tal tecnologia de forma mais acessível e portátil e que necessita de flexibilidade para que os pesquisadores possam adaptá-las às suas necessidades. (1) O objetivo deste projeto é a definição de um *framework* que auxilie a programação e gerenciamento dos equipamentos – criação de interfaces – que seja flexível e de fácil uso, o que não é encontrado nos sistemas comerciais. Agregados a isto, ferramentas que deem suporte ao *framework* para o ambiente de desenvolvimento Eclipse deverão ser geradas como *plug-ins,* oferecendo maior suporte e agilidade ao pesquisador. Dentro desta estrutura, o *framework* PyMR (2) oferece uma API generalizada para programação e configuração dos sistemas de RM, enquanto outra API derivada deste constitui o *back-end,* que se comunica em mais baixo nível com o hardware. Os *plug-ins* integrados ao Eclipse têm a função de auxiliar o programador com tarefas repetitivas ou que possam ser programadas, acelerando o processo de desenvolvimento. Todo o *framework* é suportado por técnicas atualizadas de programação que geram uma API capaz de ser integrada com outras ferramentas externas como simuladores e bibliotecas científicas. As versões preliminares já estão em uso nos sistemas de RM locais. O conjunto de *framework* e *plug-ins* mostra-se extremamente versátil e flexível, o que reflete o alto poder de geração de novas tecnologias ou novas aplicações para as já existentes.

Palavras-chave: Interface de programação de aplicação. Ambiente integrado de desenvolvimento. Ressonância Magnética.

Referências:

1 COLNAGO, L. A. et al. Why is inline NMR rarely used as industrial sensor? Challenges and opportunities. **Chemical and Engineering Technology**, v. 37, n. 2, p.191-203, 2014.

2 PIZETTA, D. C. **Biblioteca, API e IDE para o desenvolvimento de projetos de metodologias de ressonância magnética**. 2014. 93 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

PG131

Identificação de minerais por processamento computacional

QUEIROZ, A. A. A. E. de[1]; ANDRADE, M. B. de[1]

alfredo.queiroz@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O Brasil é rico em recursos minerais, sendo que a variedade e quantidade destes são provenientes da diversificada formação geológica do país. Em comparação com outros países, há poucas ocorrências brasileiras totalmente caracterizadas. Há aproximadamente 70 minerais-tipo aprovados pela Associação Mineralógica Internacional (IMA). Os minerais possuem diversos tipos de aplicação como na indústria de aço (com os minérios de cobre e ferro) e na elaboração de novos compostos sintéticos. (1) Este trabalho procura facilitar a identificação de espécies minerais por meio de algoritmos utilizando os dados provenientes da Espectroscopia Raman. Como esta técnica espectroscópica requer pouca preparação da amostra (2), se torna ideal para os trabalhos com minerais. Na parte computacional, busca utilizar redes neurais artificiais para receber informações e gerar respostas. (3) No caso, a rede possui algoritmos exploratórios para analisar bases de dados mineralógicos.

Palavras-chave: Minerais. Raman. Identificação.

Referências:

1 ATENCIO, D. The discovery of new mineral species and type minerals from Brazil. **Brazilian Journal of Geology**, v. 45, n. 1, p. 143-158, 2015.

2 GRIFFITH, W. P. Raman spectroscopy of minerals. **Nature**, v. 224, n. 5216, p. 264-266, 1969.

3 DUCH, W.; DIERCKSEN G. H. F. Neural networks as tools to solve problems in physics and chemistry. **Computer Physics Communications**, v. 82, n. 2-3, p. 91-103, 1994.

PG132

A comparison between Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and Flame Atomic Absorption Spectrometry (FAAS) data of soybean leaves: an evaluation of LIBS measures quality for future quantitative and diagnostic analysis

RANULFI, A. C.[1,2]; SENESI, G. S.[3]; WATANABE, A.[2,4]; CAETANO, J.[24]; MEYER, M.[5]; MILORI, D. M. B. P.[2]

aniranulfi@gmail.com

[1] Insituto de Fisica de São Carlos - USP

[2] Embrapa Instrumentação Agropecuaria - CNPDIA

[3] CNR, Istituto di Nanotecnologia - NANOTEC

[4] Departamento de Física - UFSCAR.

[5] Embrapa Soja

Soybean and its derivatives are one of the most valuable and traded agricultural commodities worldwide. The biggest problem faced by the producers is the reduction of soybean yield due to diseases. In Brazil, the green stem and foliar retention (GSFR), a syndrome popularly known as "Soja Louca II", currently ascertained to be caused by the nematode Aphelenchoides besseyi, was recently described as affecting soybean plants and causing concerns. (1) Unfortunately, no effective methods of early diagnosis and treatments are known. In an attempt to better understand the plant nutritional changes caused by GSFR infection, it was analyzed soybean leaves collected from healthy and sick plants. The goal is to evaluate comparatively, healthy and sick samples, for their content of nutrients: Ca, K, Mg, Fe, Na, and Zn, by double pulse laser-induced breakdown spectroscopy (DP-LIBS) (2) operating in collinear configuration. In general, the relative simplicity of LIBS instrumentation and the minimal sample preparation required makes it a valuable tool for agriculture application, including nutritional investigation and disease diagnosis of the plant. Atomic absorption spectrometry (AAS), a trustable analytical tool was used as reference method. The Pearson coefficients obtained for the correlation between concentration measured by AAS and element emission peak area in DP-LIBS experiment were among 0.7 and 0.9 for the nutrients analyzed, i. e., a strong correlation was found for one set of seventy leaves samples evaluated. This comparison is relevant to demonstrate the quality of the LIBS data obtained to be applied in the next step of the analysis, employing the Calibration Free (CF) method for a quantitative LIBS analysis. (3) The CF is based on the local thermodynamic equilibrium (LTE) assumption, and more specifically on the Boltzmann distribution, though it is possible to obtain the temperature and the total number density of the given emitting species in the ground state. Since this is proportional to the species weight percentage in the sample (assuming that the ablation is stoichiometric), after a normalization process, it is

possible to determine the element concentration. Finally, by the analysis of plant nutrients composition, the possibility of using LIBS and CF method, associated with chemometrics, will be evaluated as a convenient analytical tool to discern early between healthy and GSFR infected plants. This result can help the producers manage better and faster this disease in the field, increasing the production yield.

Palavras-chave: Nutritional evaluation. Leaf diagnosis. Soybean. Green stem and Foliar retention. Laser-induced breakdown spectroscopy.

Referências:

1 MEYER, M.C. et al. Soybean green and stem foliar retention syndrome caused by *Aphelenchoides besseyi*. **Tropical Plant Pathology.** 2017.doi:10.1007/s40858-017-0167-z..Disponivel em: <https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs40858-017-0167-z>. Acesso em: 24 ago. 2017.

2 MUSAZZI, S.; MUSAZZI, S.; PERINI, U. **Laser-induced breakdown spectroscopy**. Berlin: Springer Verlag, 2014. doi:10.1007/978-3-642-45085-3.

3 CIUCCI, A. et al. New procedure for quantitative elemental analysis by laser Induced plasma spectroscopy. **Applied Spectroscopy**, v.53, n.8, p.960-964, 1999. doi: 10.1366/0003702991947612.

PG133

Modelos análogos: o despertar do vácuo.

RIBEIRO, C. C. H.[1]; VANZELLA, D. A. T.[1]

caiocesarribeiro@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Modelos análogos para a gravitação têm sido amplamente utilizados para estudar propagação de sinais em espaços-tempos de difícil acesso, como por exemplo, buracos negros. (1) Em sua grande parte, estes modelos resultam de como pequenas perturbações de um campo de fundo se acoplam com o mesmo através de não linearidades. Por exemplo, foi mostrado recentemente como modelar flutuações do cone de luz, um efeito esperado em gravitação quântica, utilizando um material dielétrico não linear. (2) Neste trabalho simplificado, mostraremos que é possível utilizar ótica não linear para modelar propagação de campos de spin 0 com potencial efetivo não trivial. Assim, para certos materiais, este modelo pode ser utilizado para estudar o mecanismo de instabilidade do vácuo conhecido como despertar do vácuo. (3)

Palavras-chave: Modelos análogos. Ótica não linear. Despertar do vácuo.

Referências:

1 BARCELÓ, C.; LIBERATI, S.; VISSER, M. Analogue gravity. **Living Reviews in Relativity**, v. 8, n. 12, p. 1-113, 2005.

2 BESSA, C. H. G. et al. Model for lightcone fluctuations due to stress tensor fluctuations. **Physical Review D**, v. 93, n. 6, p. 064067-1-064067-7, 2016.

3 LIMA, W. C. C.; VANZELLA, D. A. T. Gravity-induced vacuum dominance. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 16, p. 161102-1-161102-4, 2010.

PG134

Multi-target nanocarrier design to the sustained release of paclitaxel targeting transferrin receptor and the metastatic factor S100A9

RIBOVSKI, L.[1]; CANCINO-BERNARDI, J.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]

lais.ribovski@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Nanotechnology application in medicine has brought unique advances to cancer treatment, mostly to the delivery of chemotherapy drugs. Although, efforts are still required to increase treatment specificity and NCs uptake using targeted delivery system. This project focuses in the development of multi-target polymeric nanocarrier (NC) to treat epithelial cancer, e.g. lung and breast cancer, some of the most frequently diagnosed cancers. (1) By targeting not only cell membrane proteins but also cytosolic proteins, we aim to improve cancer treatment combining transferrin receptor (TFRC) high-expression levels in cancer cells and S100A9 proteins association with metastatic process. (2) Through the interaction ligand-receptor between transferrin (Tf) and transferrin receptor, NCs uptake and cytotoxic specificity is increased in cancer cells, while antigen-antibody interaction will target the cytosolic proteins S100A9 and malicious exosomes associated to tumor metastasis, also trough S100A9 proteins, a known metastatic factor enriched in malicious exosomes. (3) First crucial step is to develop a NC capable of sustained release of a chemotherapy drug followed by the conjugation of transferrin and anti-S100A9. The chemotherapy drug, paclitaxel (PTX), a hydrophobic drug, was entrapped in a polymeric NCs composed of poly(lactide-co-glicolic acid) (PLGA) Resomer 503H 50:50 (MW 24000-38000 Da) acid terminated, and Pluronic-F127® by the nanoprecipitation method. Up to now, we could successfully synthesize the NCs with 4% (*i.e.,* weight % of the transported drug *versus* the carrier material), considering drug loading is usually less than 5% to current physical entrapment technologies. For PTX quantification, a HPLC assay has been developed to evaluated drug loading, encapsulation efficiency and release profile using C18 column (250 x 4.6 nm, 5 μm) as stationary phase and, as mobile phase, acetonitrile and 0.01% acetic acid aqueous solution with detection at 227 nm. Transferrin and anti-S100A9 combined conjugation is performed trough EDC/NHS (1-ethyl-3(3-(dimethylamino)propyl)carbodiimide (EDC) and N-hydroxysuccinimide (NHS)) chemistry. The nanocarriers conjugated with transferrin and S100A9 antibody, non-conjugated NCs and free drug are analyzed *in vitro* to establish the efficacy of the dual-target system by colorimetric assays, flow cytometry and confocal microscopy. Moreover, NCs uptake and cytotoxicity will also be addressed. Such combination provides a prominent strategy to reach tumor and metastatic cells by increasing uptake and specificity avoiding healthy cells.

Palavras-chave: Polymeric nanocarriers. Multi-target delivery. Cancer.

Referências:

1 SIEGEL, R. L.; MILLER, K. D.; JEMAL, A. Cancer statistics, 2017. **CA**: a cancer journal for clinicians, v. 67, n. 1, p. 7-30, 2017.

2 BRESNICK, A. R.; WEBER, D. J.; ZIMMER, D. B. S100 proteins in cancer. **Nature Reviews Cancer**, v. 15, n. 2, p. 96-109, 2015.

3 GEBHARDT, C. et al. S100A8 and S100A9 in inflammation and cancer. **Biochemical Pharmacology**, v. 72, n. 11, p. 1622-1631, 2006.

PG135

Avaliação de um sistema portátil de tempo de vida de fluorescência para diagnóstico precoce de câncer de colo de útero

ROMANO, R. A.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]; KURACHI, C.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]

renan.romano@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A neoplasia intraepitelial cervical (NIC) é o precursor do câncer de colo uterino e associado com a infecção por HPV (*Human Papiloma Virus*), este tipo de câncer é o terceiro mais frequente em mulheres. Apesar de ser bastante presente, tipo de câncer tem chance de cura de até 100% se diagnosticado precocemente. (1) Atualmente, o diagnóstico de NIC é realizado através de exames de Papanicolau e colposcopia, entretanto, apesar destes exames terem alta sensibilidade, este tipo de diagnóstico tem baixa especificidade. O diagnóstico óptico é uma potencial ferramenta para detecção de NIC já que é de baixo custo e minimamente invasivo. (2) As técnicas de fluorescência já vêm apresentando grande potencial de uso clínico , entretanto acredita-se que não só a fluorescência estacionária, mas sim como a dinâmica podem contribuir para um diagnóstico com maior precisão. (3) Por este motivo este projeto visa monitorar os fluoróforos endógenos NADH e FADque estão envolvidos à cadeia respiratória e liberação de energia nas células, estes devem sofrer alterações no tempo de vida de fluorescência decorrentes da doença, permitindo assim o diagnóstico precoce de câncer de colo de útero. O desafio deste projeto é quantificar e mapear em tempo real a localização do tumor nas regiões de estudo, buscando assim otimizar o manejo do paciente.

Palavras-chave: Diagnóstico precoce.Tempo de vida de fluorescência. Câncer de colo uterino.

Referências:

1 STEBEN, M.; DUARTE-FRANCO, E. Human papillomavirus infection: epidemiology and pathophysiology. **Gynecologic Oncology**, v. 107, n. 2, p. S2–S5, 2007.

2 VANSEANSEVICIUTE, R. et al. 5-Aminolevulinic acid-based fluorescence diagnostics of cervical preinvasive changes. **Medicina**, v. 50, n. 3, p. 137–143, 2014.

3 TAO, X.H. Y.; et al. Efficacy and safety of photodynamic therapy for cervical intraepithelial neoplasia: a systemic review. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 11, n. 2, p. 104–112, 2014.

PG136

Análise de redes de interação de proteínas através da correlação entre suas medidas de centralidade.

RONQUI, J. R. F.[1] ; TRAVIESO, G.[1] [1] Instituto de Física de São Carlos - USP
zericardo182@gmail.com

Na natureza existem diversos sistemas que são compostos por elementos que de alguma forma interagem uns com os outros. Para entender este tipo de sistema, frequentemente é necessário considerar-se o sistema inteiro, não se podendo utilizar a abordagem reducionista empregada em vários campos da ciência. Para estudá-los podemos utilizar as redes complexas: grafos compostos por vértices (representando os elementos) e arestas (suas interações) que possuem características topológicas não triviais. (1) Alguns exemplos onde redes complexas podem ser utilizadas são: redes de distribuição de energia, interações sociais, páginas web, interação entre neurônios, entre outras. Entre as diversas áreas do conhecimento, a biologia apresenta diversos exemplos de sistemas onde redes podem ser utilizadas, entre eles as redes de interação de proteínas. Neste trabalho utilizaremos redes complexas para o estudo e comparação de redes de interação entre proteínas; mais especificamente, utilizaremos medidas topológicas para avaliar a importância dos vértices das redes para caracterizar e comparar interações entre proteínas de diferentes organismos e com alguns modelos de redes. As informações sobre as proteínas e suas interações foram obtidas através do banco de dados STRING. (2) Nossos resultados mostram que independentemente do organismo considerado as medidas de centralidade apresentam padrões similares de correlação para as redes de interação de proteínas, onde o valor da correlação (tau de Kendall) entre os pares de medidas também apresenta resultados semelhantes entre os organismos; esses resultados são essencialmente diferentes para os modelos usados para comparação. Outro ponto observado é que para alguns organismos a medida de centralidade de autovetor apresenta valores muito altos para alguns poucos elementos. Esse fenômeno, conhecido como localização da centralidade de autovetor, foi previamente estudado em modelos, mas apenas recentemente um trabalho abordou esse fato para redes reais. (3) Nossos resultados são os primeiros que reportam esse fenômeno para redes de interação de proteínas. Entretanto, mais estudos sobre este tópico precisam ser realizados, já que ainda não existe uma definição de localização para redes reais (isto é, sem envolver o limite de redes muito grandes).

Palavras-chave: Redes complexas. Interação entre proteínas. Medidas de centralidade.

Referências:

1 NEWMAN, M. E. J. **Networks:** an introduction. Oxford: Oxford University Press, 2010. 772 p.

2 SZKLARCZYK, D. et al. STRING v10: protein-protein interaction networks, integrated over the tree of life. **Nucleic Acids Research**, v. 43, n. D1, p. D447-D452, 2015.

3 PASTOR-SATORRAS, R.; CASTELLANO, C. Distinct types of eigenvector localization in networks. **Scientific Reports**, v. 6, p. 18847-1-18847-9, 2016. doi: 10.1038/srep18847.

PG137

Development of a fluorescence lifetime imaging microscope for clinical applications

ROSA, R. G. T.[1]; JO, J.[2]; KURACHI, C.[1]

ramongabriel.tr@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Department of Biomedical Engineering - Texas A&M University

Fluorescence based microscopy techniques have been extensively used in biological sciences due to their remarkable capability of investigating biochemical properties of tissues. The most common approach is the steady-state fluorescence microscopy, in which the resulting image contains essentially information about the sample fluorescence spectrum. Although the said approach is very powerful, it is often not enough to identify many chemical processes that may indicate relevant conditions of biological tissues. Furthermore, the fluorescence spectrum of a sample may be affected by the absorption and elastic scattering on both the excitation and emission wavelengths. Going beyond the steady-state approach, however, it is possible to acquire information about the intrinsic properties of the tissue. (1) The fluorescence dynamics analysis is not only less sensitive to the media influence but is sometimes capable of distinguishing between spectrally identical fluorescent structures. However, the Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy (FLIM) techniques require a more sophisticated instrumentation, that creates an intrinsic difficulty for the use of such microscopes in clinical environments, specially for *in vivo* imaging. There are no commercial FLIM systems suitable for such applications. The authors report on the development, assembly and characterization of a compact, high-speed, multispectral FLIM system for *in vivo* imaging. The system features a handheld probe designed to allow the examination of difficult-to-access areas like the cervix.

Palavras-chave: FLIM. Fluorescence lifetime. Optical imaging.

Referências:

1 MARCU, L. Fluorescence lifetime techniques in medical applications. **Annals of Biomedical Engineering**, v. 40, n. 2, p.304-331, 2012.

PG138

Simulação de potenciais moleculares em íons armadilhados

ROSSETTI, R.; F.[1]; MOUSSA, M.; H., Y.[1]

rafael.f.rossetti@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A trinta e seis anos atrás no início da década de 80, estava claro que a simulação da mecânica quântica era um grande desafio. Em primeiro lugar devido a quantidade de memória necessária para reproduzir sistemas quânticos que cresce exponencialmente com o aumente de partículas em um sistema quântico. Além disso, a evolução temporal do sistema quântico requer um número de operações que aumenta exponencialmente com o número de partículas no sistema. Os dois tipos de crescimento exponencial citados não tem como ser evitados, apenas métodos aproximativos podem ser utilizados para simplificar o problema, como por exemplo o método de Monte Carlo. No entanto, dependendo do sistema quântico que se tem interesse em estudar as aproximações não são suficientes e tem suas limitações. A ideia para resolver o problema de memória dos computadores tradicionais veio de Richard Feynman com a computação quântica, que pode ser tratado nos dias atuais como um simulador de sistemas físicos, esse que requer um grande controle e precisão em medida experimentais, um dos sistemas que possui esses requisitos é a armadilha iônica. (1) Hoje em dia vem crescendo o interesse em computação quântica, devido as aplicações em diversas áreas como por exemplo física, a química e a biologia. Especificamente a área da química que representa uma das mais bem sucedidas aplicações da mecânica quântica. (2) Foi provado que a química é uma excelente plataforma para a compreensão da matéria da escala atômica até o molecular envolvendo métodos teóricos e experimentais. Em 1929, logo após completar a teoria quântica, Dirac especulou que as leis fundamentais da química eram completamente conhecidas, mas a aplicação dessa teoria nos leva a equações que são muito complexas para resolver. Com o desenvolvimento do computador vários métodos foram criados tais como: método de Hartree-Fock, Monte Carlo quântico, entre outros. No entanto, todos esses métodos falham em sistemas quânticos que a escala aumenta, logo não é possível resolver problemas de sistema quânticos em grande escala. Para resolver esse problema, nós desenvolvemos um engenharia de hamiltoniano no sistema de íons armadilhados, que tem o requisitos básicos para ser um computador quântico, para simular o potencial molecular de Morse que contribui para resolver problemas de muitos corpos interagente e reproduzir alguns potenciai moleculares que não são conhecidos teoricamente por completo. Também simularmos os operadores de momento angular, que em sistema de íons armadilhados pode contribuir não apenas para química como também para física no contexto de computação quântica, pois é capaz de gerar proteção de dois qubits, de estados emaranhados do grau de liberdade eletrônico e vibracional, além disso, a simulação do operador momento angular pode produzir a simulação de um super-átomo que é capaz de absorve um fóton em uma taxa mais rápida que de um átomo natural. Para finalizar simulamos, no contexto de íons armadilhados, o principio de exclusão de Pauli que permite criar um rede de fermíons para estudar a interações o comportamento coletivo dos fermíons. (3)

Palavras-chave: Íons armadilhados. Simulação de acoplamentos spin-órbita em íons armadilhados. Simulação de átomos e moléculas.

Referências:

1 LEIBFRIED, D. et al. Quantum dynamics of single trapped ions. **Reviews of Modern Physics**, v. 75, n. 1, p. 281-324, 2003.

2 GERRITSMA, R. et al. Quantum simulation of the Dirac equation. **Nature**, v. 463, n. 7277, p. 68-71, 2010.

3 BERNARDES, E. et al. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. **Physical Review Letters**, v. 99, n. 7, p. 076603-1-076603-4, 2007.

PG139

Bosons in optical lattices

SANTANA, F. T.[1]; SANTOS, F. E.[2]; TUK, A. P.[3]

felipe.taha@usp.br

[1] Instituto de Fiisca de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal de São Carlos - UFSCAR

[3]Fakultat fur Physik - Universitat Bielefeld

Bosons in optical lattices can exist in two different phases: Mott-insulator and superfluid. The phase diagram regarding the phase transition between these two calculated via standard perturbation theory present some deficiencies due to degeneracy. The mean-field approximation has been used to evaluate the phase diagram, and an effective action approach was done to improve the result for zero temperature (1) and for arbitrary temperature. (2) Therefore, we present a degenerate approach to correctly obtain the phase diagram and the condensate density for bosons in optical lattice at finite temperature.

Palavras-chave: Optical lattices. Mott-insulator. Superfluid. Phase transition.

Referências:

1 SANTOS, F.E.A.; PELSTER, A.Quantum phase diagram for bosons in optical lattices. **Physical Review A**, v.79, p.013614,2009.doi:10.1103/PhysRevA.79.013614

2 BRADLYN, B.; SANTOS, F. E. A.; PELSTER, A. Effective action approach for for quantum phase transitions in bosonic lattices. **Physical Review A**, v.79, p.013615, 2009.doi:10.1103/PhysRevA.79.013615

PG140

Fabrication Poly(p-phenylenevinylene) (PPV)-doped 3D microstructures by fs-laser direct writing via two-photon polymerization (2PP)

SALAS, O. I. A.[1]; TOMAZIO, N. B.[1]; OTUKA, A. J. G.[1]; ANDRADE, M. Bde.[1]; BALOGH, D. T.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]

oriana@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Poly (para-phenylene vinylene) (PPV) is a key material for optoelectronics because it combines the potential of both polymers and semiconductors. As an alternative to its poor solubility in organic solvents, it has been synthesized via solution-processable precursor route, in which the precursor polymer (PTHT) is thermally converted to PPV throughout the sample as a whole. Much effort has been devoted to fulfill spatial selectivity of PPV conversion. (1) However, none of the methods proposed stand for PPV conversion three dimensionally, which would be appealing for the design of microdevices. Here, we demonstrate the potential of fs-laser direct writing via two-photon polymerization (2PP) to fabricate PPV-doped 3D microstructures. The PPV precursor polymer (PTHT) is easily incorporated into the polymeric host material and it is subsequently converted to PPV through a straightforward thermal treatment. Micro-photoluminescence, absorption and Raman spectroscopy measurements, taken prior and after thermal conversion, confirm the PTHT to PPV conversion. Moreover. Fs-laser direct writing via 2PP can be exploited to fabricate a variety of 3D microdevices, thus opening new avenues in polymer-based optoelectronics.

Palavras-chave: Two-photon polymerization. Electroluminescent polymers. PPV conversion.

Referências:

1 AVILA, O. I. et al. Femtosecond-laser direct writing for spatially localized synthesis of PPV. **Journal of Materials Chemistry C**, v.5, n.14, p.3579-84, 2017.doi:10.1039/C7TC00079K.

PG141

Characterization of Odorant-binding proteins of Rhodnius prolixus

SAMPAIO, R. P.[1]; THIEMANN, O. H.[1]

renataportosampaio@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Insects are essential to life on earth. However, some can affect negatively human society causing public health problems acting diseases vectors. Throughout Latin America some vector-borne neglected diseases include: Chagas' disease, dengue and leishmaniasis, transmitted by hematophagous insects diverse as mosquitoes, triatomine bugs and sandflies. (1) Focusing in Chagas' disease and acknowledging that in Brazil the most effective method to prevent its spread is by vector control (WHO), we aim to study proteins responsible for the interaction of the vector *Rhodnius prolixus* and its surroundings. Within an sophisticated olfactory system, Odorant-Binding Proteins (OBPs) perceive semiochemicals of the environment and modulate specific insect behavior. Odorants that enter the sensillum pores are bound to OBPs and transported through the sensillar lymph towards receptors in the chemosensory neurons. (1) Thus this chemical *stimuli* compel the activity of reproduction and survival of insects, including host-seeking, oviposition , and sugar-feeding. (2) Based on sequence similarity searches of the *R. prolixus* genome we selected four putative OBPs genes and expressed in heterologous *Escherichia coli* systems. Three of this proteins were expressed and purified. To elucidate the structure of the proteins we are aiming to obtain crystals for X-Ray Diffraction and preparing samples for NMR. Those results will be compared to the secondary structure composition acquired with Circular Dichroism (CD). Regarding the function of the proteins, interaction experiment will be performed, with selected volatile chemical compounds, by Isothermal titration calorimetry (ITC). These results will provide insight into the function and structure of triatomine OBPs potentially leading to a targeted vector control approach.

Palavras-chave: Odorant-Binding proteins. Rhodnius prolixus. Chagas' disease.

Referências:

1 LEAL, W. S. Odorant reception insects roles of receptors, binding proteins, and degrading enzymes. **Annual Review of Entomology**, v.58, p.373–391, 2013.doi:.org/10.1146/annurev-ento-120811-153635.

2 KRUSE, S. W. et al. Structure of a specific alcohol-binding site defined by the odorant binding protein LUSH from Drosophila melanogaster. **Nature Structure Biology,** v.10, n.9, p.694–700,2003.

PG142

Characterization of components of Naegleria gruberi's selenocysteine biosynthesis and insertion pathways: selenophosphate synthetase and tRNAsec

SANTOS, T.[1]; THIEMANN, O. H.[1]

thomas.ms@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Selenocysteine (Sec), also known as the twenty-first amino acid, represents the main available organic form of selenium. The protozoan Naegleria gruberi presents itself as quite an interesting target for understanding the evolution of this amino acid's metabolism in the eukaryotic domain of life due to its privileged position in the evolutionary scale. Recently, a gene encoding for the protein selenophosphate synthetase (SPS2) has been identified in N. gruberi. (1) The N. gruberi's SPS2 contains two distinct domains: one that shows high sequence identity with bacterial SPSs and another one similar to prokaryotic methyltransferases. (1) Furthermore, another gene identified in the protozoan is responsible for the expression of tRNAsec, a tRNA specific for the insertion of selenocysteine. (1) In addition to this, bioinformatics data indicate the existence of yet another tRNAsec, suggesting that it could either be an additional tRNAsec for incorporation of Sec or a tRNA that carries another amino acid but recognizes the same codon. The present project intends to study the SPS2 domain which has a high sequence identity with prokaryotic methyltransferases and proposes experiments allowing the elucidation of the newly identified tRNAsec's function. For the SPS2 domain, the protein has been heterologously expressed in E. Coli, was urea denatured before the purification process and used to produce polyclonal antibodies. The antibodies have shown low specificity for the protein but now immunoprecipitation experiments are underway to try and identify isolated molecules using mass spectrometry. For the tRNA, the two different tRNAsec candidates have been isolated and purified. Spectroscopic measures are to be made to determine which amino acid each one carries. Molecular biology experiments are planned to help identify any post-transcriptional modification process that may have occurred. RT-qPCR assays are being standardized so they can be used for further investigations regarding levels of gene expression for both SPS2 and the tRNAs. Together, these experiments may contribute to the elucidation of some key aspects of the selenium metabolism in eukaryotes.

Palavras-chave: Naegleria. Selenocysteine. tRNAsec.

Referências:

1 SILVA, M.T. da et al. Selenocysteine biosynthesis and insertion machinery in Naegleria gruberi. **Molecular Biochemical and Parasitology,** v.188, n.2,p.87-90, 2013.

PG143

Low-dimensional description on globally coupled oscillators

SANTOS, E. R. dos[1]; SILVA, T. P. da[2]

edmilson.roque.santos@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

In nature we found several systems consisting of a large number of interacting oscillators sharing a common characteristic: spontaneous emergence of collective behaviour. Examples are diverse, for instance in neuronal dynamics, pathological tremors and epileptic seizures. Power grid dynamics, where absence of synchronous state may lead to blackouts. Or even, in circuits dynamics, the synchrony of a superconductor Josephson junction array. In special, the later case has an historical importance for the present work. Couple years ago a promising step was accomplished when some researchers partially integrated the nonlinear high-dimensional system of equations describing Josephson junction array in the overdamped limit. They found low-dimensional system's behaviour suggested in the numerical experiments, what was called Watanabe-Strogatz ansatz. (1) More precisely, the N dimensional system of ordinary differential equations were reduced to three ones. Besides $N-3$ constants of motion give rise to full fill the missing dimensions. Such result has attracted much attention of researchers in the last two decades and much has been done in this direction. Therefore, in this project we aimed at studying dynamical and geometrical properties of such Watanabe-Strogatz ansatz and their implications. From the dynamical point of view we are able to use a symmetry argument that states a transformation that maps solutions to solutions. Such transformation is known as a Lie subgroup of Möbius transformation. The three parameters of such group generates the low-dimensional description, in other words, they give a similar version of the three-dimensional system discovered by Watanabe-Strogatz ansatz. Furthermore, the constants of motion are simply complex valued functions called cross-ratios that are invariant by Möbius group action. (2) From the geometry we find a Riccati equation as consequence of the Möbius group and its projective nature. The original system of equations on the torus are mapped to the complex projective space when we identify the Möbius group with the Projective Special Linear group. In this framework, we gain new perspectives. The central result concerns about the foliation of the phase space by the constants of motion. (3) With these facts in mind, our goal in the final part of the project is ambitious: extend the low-dimensional description on coupled oscillators of larger dimensional system. Recently numerical evidences has shown that the system of equations describing Josephson junction array without the overdamped limit present low-dimensional behaviour as well. For this reason, we hope using a symmetry argument to set a transformation mapping solutions to solutions and obtain a lower system of equations. Understanding properly this system sheds a light on power systems dynamics, since the same system of equations is a tractable way of describing the unities of the power grid system.

Palavras-chave: Synchronization. Coupled Oscillators. Möbius group reduction.

Referências:

1 WATANABE, S.; STROGATZ, S. H. Constants of motion for superconducting Josephson arrays. **Physica D,** v. 74, n. 3–4, p. 197–253, 1994

2 MARVEL, S. A.; MIROLLO, R. E.; STROGATZ, S. H. Identical phase oscillators with global sinusoidal coupling evolve by Möbius group action. **Chaos**, v. 19, n. 4, 2009. doi.org/10.1063/1.3247089.

3 STEWART, I. Phase oscillators with sinusoidal coupling interpreted in terms of projective geometry. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v. 21, n. 06, p. 1795–1804, 2011.

PG144

Análise de imagens de fluorescência no diagnóstico de doenças de soja: ferrugem asiática e haste verde e retenção foliar

SBRISSA NETO, D. A.[1]; PEREIRA, D. M. B.[2]

sbrissa@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Fisica de São Carlos - USP

[2] Embrapa Instrumentação Pecuária - CNPDIA

Apesar de o Brasil ser um dos maiores exportadores de soja do mundo, estima-se que muito da produção é perdida pela infestação de patógenos nocivos à cultura. Cada vez mais tem-se buscado técnicas de manejo no campo, com o intuito de identificar possíveis pragas e combatê-las efetivamente. Nesse viés, o uso de técnicas biofotônicas tem se destacado como uma importante alternativa na detecção de anomalias nos mais diversos sistemas biológicos. Dentre essas técnicas, a fluorescência tem ganhado destaque, graças a sua sensibilidade e precisão. Sendo assim, o objetivo do presente trabalho é fazer uso de técnicas de imagem de fluorescência no diagnóstico de duas importantes doenças de soja: a mais comum no Brasil, a ferrugem asiática; e a mais recente reconhecida pelo Ministério da Agricultura Pecuária e Abastecimento (MAPA), a haste verde e retenção foliar. (1) Para o presente estudo, foi realizado um experimento nas dependências da EMBRAPA Soja, localizada em Londrina-PR, com a expressão de ambas doenças em plantas de soja, além de um grupo controle para comparação. No total foram realizadas 5 coletas para a ferrugem asiática e 3 coletas para a haste verde e retenção foliar, num período de 14 dias de inoculação. Cada coleta era composta por 15 amostras de cada grupo. De posse das amostras, foram obtidas imagens de fluorescência a partir dos equipamentos presentes na EMBRAPA Instrumentação, localizada em São Carlos – SP. Foi utilizado o estereomicroscópio comercial SteReo Lumar.V12 com excitação em $\lambda = 365\eta m$ (EM-365), no qual foram feitas imagens tanto da nervura central da folha, quanto da região foliar. Além disso, foram obtidas imagens a partir de um sistema de fluorescência induzida por laser (LIFI) com excitação em $\lambda = 457\eta m$. Foram implementados algoritmos em Matlab para pré-processamento das imagens, segmentação, extração de atributos e classificação das classes. (2, 3) Além disso, utilizou-se o software Weka para o processo de seleção de atributos e testes de classificadores. Como principais resultados, inicialmente foi implementado a classificação coleta a coleta para ambas doenças, a fim de avaliar se as imagens de fluorescência seriam capazes de identificar a evolução da doença. Nesta etapa os resultados foram satisfatórios, onde os valores de acurácia, em ambos casos, foram coerentes e mostraram uma evolução aceitável na classificação. Destaca-se nessa fase a detecção da ferrugem, com cerca de 80% de precisão com apenas três dias de inoculação e praticamente 100% após 10 dias de infestação – ambos casos em fase assintomática. Além disso, outro importante resultado foi o estudo da viabilidade da detecção das doenças em campo. Para tal, foram utilizadas todas as amostras em fase assintomática de ambas doenças e feita a classificação. Isso garante a viabilidade de detectá-las num período amplo de tempo, e não apenas em um momento específico. Os classificadores alcançaram nesse caso, 90% para acurácia da ferrugem e 80% de acurácia para a haste verde e retenção foliar. Em conclusão, as técnicas de imagens de fluorescência tem-se revelado uma alternativa importante na detecção precoce das doenças estudadas no presente projeto.

Palavras-chave: Diagnóstico precoce. Doenças de soja. Fluorescência da clorofila. Processamento de imagens.

Referências:

1 EMBRAPA. **Soja louca II é reconhecida como nova doença de soja pelo MAPA**. Disponível em: <https://www.embrapa.br/busca-de-noticias/-/noticia/5213621/soja-louca-ii-e-reconhecida-como-nova-doenca-da-soja-pelo-mapa> Acesso em: 19 ago. 2017.

2 COSTA, L. F. da; CESAR JR, R. M. **Shape analysis and classification:** theory and practice. New York: CRC Press Inc., 2000.

3 BISHOP, C. M. **Pattern recognition and machine learning**. Berlin: Springer Verlag, 2006.

PG145

Complex networks on the modelling and characterization of multispectral images

SCABINI, L. F. S.[1]; BRUNO, O. M.[1]

leonardo.f.scabini@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Texture analysis aims to mimic the human visual system by measuring physical aspects of an object surface such as roughness and color. These characteristics are registered in a digital image as a pattern of intensity changes. However, the physical world imposes on these raw intensity changes a wide variety of spatial organization, roughly independently at different scales (1), which makes the task challenging. There are different approaches to texture analysis, and most works in the literature consider gray-level images and focus on the statistical analysis of the pixels. In these cases, the information of color is discarded. In fact, some authors (2) have argued that the improvement by including color is minimal compared to the increase of the features dimensionality. This assumption should be taken cautiously, as psychophysical experiments have shown that having color in images helps to recognize things faster and to remember them better. Moreover, there are scientific images obtained by modern microscopes that go beyond the traditional 3-channel color space. For instance, in Confocal Laser Scanning Microscopy images are generated with 32 channels, where each pixel value varies from 0 to 65535 (16 bits), which represents a difference of information in the order of $10^{145}\%$ if compared to the traditional RGB format (3 channels with 8-bit pixels). It is clear to see that multispectral images carry far more information if compared to simpler formats, however, few works consider that to build a single analytic model. The common approach is to analyze each color channel individually or to combine color statistics (such as color histograms) with gray-level texture descriptors. We believe that better models are needed, in which texture and color are incorporated in a more integrative approach. Thus we propose the use of Complex Networks to model and characterize multispectral images. This idea was first proposed to gray-level texture. (3) We then extend this approach by building a multilayer Complex Network that connects pixels in the same and in different color channels. This approach includes both within and between (opponent) color-channel correlation. Preliminary classification results with 3 RGB datasets shown that the model overcomes state-of-the-art methods. We now intend to apply the proposed model to multispectral images of Confocal Laser Scanning Microscopy (32 channels).

Palavras-chave: Complex networks. Color-texture. Pattern recognition.

Referências:

1 MARR, David. **A computational investigation into the human representation and processing of visual information.** San Francisco: Freeman, 1982.

2 MAENPÃÂ., T.; PIETIKAINEN, M.Classification with color and texture: jointly or separately? **Pattern Recognition, v.** 37, n.8, p.1629-1640, 2004.

3 CHALUMEAU, T., et al. Optimized texture classification by using hierarchical complex networks measurements In: ELECTRONIC IMAGING, 2006, San Jose,Californa. **Proceedings...**California: SPIE,2006. v.6070, p. 238-245.

PG146

Estudo da via de incorporação de selenocisteínas: compreensão dos mecanismos de interações macromoleculares

SCORTECCI, J. F.[1]; SERRÃO, V. H. B.[2]; FERNANDES, A. de F.[1]; BASSO, L. G. M.[3]; OLIVEIRA NETO, M. de[4]; THIEMANN, O. H.[1]

jessica.scortecci@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Neurobiologia -Harvard Medical School

[3] Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

[4] Instituto de Biociências de Botucatu - UNESP

A existência de uma maior variedade de aminoácidos codificados pelo código genético tem estimulado estudos sobre os mecanismos de síntese, reconhecimento e incorporação nas cadeias polipeptídicas nascentes. Como exemplo, pode-se destacar a via específica de síntese do aminoácido selenocisteína que é incorporado em um códon de parada UGA através de um evento co-traducional presente tanto em procariotos como em eucariotos. Em bactérias, a via de síntese de Sec é composta pelas proteínas Selenocisteína sintase (SelA), Fator de Elongação Específico (SelB), Selenofosfato sintetase (SelD), Seril-tRNA sintetase (SerRS) e Selenocisteína liase (CsdB). A via de síntese e incorporação de Sec depende também de dois RNAs; um tRNA específico ($tRNA^{Sec}$) e uma sequência no mRNA (Sequência de Inserção de Selenocisteínas - SECIS), sinalizadora para correta incorporação de Sec junto ao códon UGA. Em eucariotos, essa via difere pela presença das proteínas O-fosfoseril-$tRNA^{Sec}$ Quinase (PSTK) e Selenocisteinil-$tRNA^{Sec}$ sintase (SepSecS), em substituição a SelA, e pela presença de proteínas ligadoras ao elemento SECIS (SBP2). (1) Pelo fato do selênio ter uma toxicidade elevada no ambiente celular, é fundamental a compreensão do mecanismo catalítico e de elementos essenciais na formação dos complexos da via na etapa de incorporação junto ao $tRNA^{Sec}$. Em bactérias, a interação entre CsdB e SelD foi proposta em 2009, no entanto, não verificada experimentalmente até o momento. (2) Além disso, foi descrita a presença da via de síntese de selenocisteínas em *Naegleria gruberi* (3), ameba não patogênica empregada como modelo para estudos de *N. fowleri,* conhecida a infectar humanos, resultando na patologia conhecida como *Meningoencefalite Amebiana Primária* (MAP). Este estudo visa compreender as interações macromoleculares entre CsdB e SelD de *E. coli* bem como de SBP2.SECIS de *N.gruberi*. A interação entre CsdB.SelD foi caracterizada por Fluorescência Intrínseca e Ultracentrifugação analítica em equilíbrio (SE-AUC), indicando alta afinidade na interação (K_D = 19,8 nM). Já a interação entre SBP2.SECIS foi caracterizada por Anisotropia de Fluorescência e SE-AUC, indicando também afinidade para o sistema (K_D = 170 nM). Além disso, medidas por Calorimetria de Varredura diferencial indicaram que a interação entre CsdB e SelD resulta em uma maior estabilidade térmica das proteínas. Ensaios de imunofluorescência *in vivo* da SBP2 serão realizados, em *N. gruberi*, bem como estudos *in vivo* envolvendo a interação entre CsdB e SelD (*E. coli*) através de duplo híbrido dirigido em sistema

Saccharomyces. cerevisiae. Testes de cristalização dos complexos, bem como espalhamento de raios-X a baixo ângulo serão feitos a fim de se obter modelos estruturais das proteínas de interesse. Dessa forma, este projeto visa ampliar o conhecimento das interações moleculares presentes na via de incorporação de selenocisteínas, sendo de grande relevância no entendimento dos determinantes moleculares de interação entre proteína-proteína e proteína-RNA.

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

Referências:

1 HATFIELD, D. L.; GLADYSHEV, V. N. How selenium has altered our understanding of the genetic code. **Molecular and Cellular Biology,** v. 22, n. 11, p. 3565-3576, 2002.

2 ITOH, Y. et al. Structure of selenophosphate synthetase sssential for selenium incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology**, v. 385, n. 5, p. 1456–1469, 2009.

3 DA SILVA, M. T.et al. Selenocysteine biosynthesis and insertion machinery in *Naegleria gruberi*. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 188, n. 2, p. 87-90, 2013.

PG147

Desenvolvimento de nanopartículas poliméricas de poli (D,L – lactídeo – co – glicolídeo) (PLGA) para entrega controlada de ácido aminolevulínico (ALA)

SILVA, G. R. da[1, 2]; SANTOS, A. L. .[2]; SANCHES, E. A.[3]; MASCARENHAS, Y. P.[1]; INADA, N. M.[1]

geisiane.silva@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] NANOMED – Nanotecnologia em Saúde e Bem-estar Ltda.

[3] Instituto de Ciências Exatas - Departamento de Física - UFA

O ácido aminolevulínico (ALA) é um precursor metabólico do eficaz fotossensibilizador protoporfirina IX (PpIX). O ALA em terapia fotodinâmica (TFD) é um grande aliado para o tratamento tópico e não-invasivo de alguns tipos de cânceres mais superficiais, por exemplo, o de pele do tipo não-melanoma. (1) O aumento da concentração de ALA após sua absorção desencadeia uma maior produção de PpIX endógena, levando ao acúmulo do fotossensibilizador nas células. Na presença de oxigênio molecular nos tecidos, geram espécies reativas (EROs) citotóxicas via fotoativação da PpIX e que levam à morte tumoral via necrose, apoptose ou autofagia. (2, 3) Embora seja um pró-fármaco eficaz, o ALA apresenta difusão em membranas celulares limitada devido à sua polaridade, não sendo capaz de permear algumas barreiras da pele, além de ser instável em ambientes fisiológicos. Estas características físico-químicas comprometem sua eficácia em TFD, pois, diminuem sua biodisponibilidade local, levando a um baixo efeito terapêutico e limitando tratamento de tumores mais profundos (1). Assim, para melhorar a eficiência do uso tópico deste pró-fármaco, propõe-se o desenvolvimento de nanopartículas poliméricas para a entrega seletiva, específica e controlada do ALA, a partir do uso de materiais e normas regulamentadas pelo FDA (*Food and Drug Administration*) e ANVISA (Agência Nacional de Vigilância Sanitária). Caracterizações físico-químicas iniciais de estabilidade da emulsão de nanopartículas apresentaram tamanho médio de (180± 2) nm, carga (-3± 1) mV e pH 5, com estabilidade de 20 dias em temperatura ambiente (25 °C). Outros estudos estão em andamento como morfologia (microscopia de força atômica), cinética de liberação (difusão em membranas), viscosidade e permeação cutânea (células de difusão de Franz). Posteriormente, células de carcinoma epidermóide humano (A 431 ATCC® CRL-1555™), de fibroblastos (HDFn ThermoFisher Scientific, C0045C) e de queratinócitos (HaCat) serão utilizadas nos ensaios *in vitro* e analisaremos por citometria de fluxo o(s) tipo(s) de morte celular, a produção de espécies reativas de oxigênio (radicais ânion superóxido, oxigênio singlete e outros), o cálcio citosólico, a cinética de produção e localização celular da pPIX (microscopia de fluorescência confocal), sempre em comparação com o fármaco na sua forma livre.

Palavras-chave: Nanotecnologia. PLGA. Ácido aminolevulínico. Terapia fotodinâmica. Câncer de pele não-melanoma.

Referências:

1 SHI, L. et al. In vitro evaluation of 5-aminolevulinic acid (ALA) loaded PLGA nanoparticles.**International Journal of Nanomedicine**, v.8, , n.1,p.2669, 2013.doi: 10.2147/IJN.S45821.

2 PASSOS, S. K. et al. Quantitative approach to skin field cancerization using a nanoencapsulated photodynamic therapy agent: a pilot study. **Clinical Cosmetic Investigacional Dermatoogy**,v.6,p.51–9,2013.doi: 10.2147/CCID.S36758..

3 SHARMAN, W.M.; ALLEN, C.M.; LIER, J.E.van. Photodynamic therapeutics: basic principles and clinical applications. **Drug Discovery Today,** v.4, n.11,p.:507–17,1999.

PG148

Signaling regulation studies of diguanylate cyclases PA0847 and PA3343 from Pseudomonas aeruginosa

SILVA, E. E. D.[1]; NAVARRO, M. V. de A. S.[1]

everton.edesio.silva@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Bacteria widely use membrane proteins to adequate their metabolism of environmental cues. Hence, the knowledge about these proteins could be potentially useful. For example, in techniques to control bacterial infections or contamination, development of biotecnological applications, or even provide insights to biosensors. Although little is known regarding mechanisms of signal transduction in bacteria. In particular about receptors that triggers synthesis or degradation of the molecule c-di-GMP, which is one of the major bacteria metabolism regulator. Therefore, we investigate two important transmembrane signaling proteins from *Pseudomonas aeruginosa.* (1) They are coded in the genes *PA0847* and *PA3343*, labels also used for proteins as usual. *P. aeruginosa* is an important model microorganism because is a common infectious pathogen to *immunocompromised* patients. Both PA0847 and PA3343 are efficient diguanylate cyclases enzymes (DGC) because they have functional GGDEF domains, used in c-di-GMP synthesis. Domains are recognizable sequence patterns that have a modular function in proteins. Previous studies shown that the same amount of c-di-GMP produced by DGCs do not impact the bacteria behavior in the same manner. (2) This finding was attribute by some unknown controlled delivery systems of c-di-GMP to its receptors, named local pool. In our lab, previous two-hybrid screening assays identified the interaction between the cytosolic portion of PA0847 and the N-terminus portion of PA3343. This interaction associate with sequence analysis sugests a new and well conserved mechanism of local pool by a interprotein regulation type. In the present study, pull-down and thermophoresis results confirmed the interaction and showed that this is dependent of the GGDEF domain of PA0847. Another proposal of this study is invastigate PA0847 intraregulation held by its extra regulatory domains CHASE4, HAMP and PAS. (3) Additional two-hybrid assays showed that the full PA0847 cytoplasmic is necessary to interaction with PA3343. Using isolated domains of PA0847 in commercial EnzChek assay and SEC-MALS analysis we observed respectivelly that HAMP domain plays an important role in c-di-GMP production and dimer and tetramer equilibrium. Nevertheless, further studies are still necessary to conclude the role of the PAS domain in enzyme autoinhibition by c-di-GMP or the role of periplasmic CHASE4 domain. These results have not been presented elsewhere and provide steps to a better understanding of the bacterial signaling via the c-di-GMP pathway.

Palavras-chave: c-di-GMP. Pseudomonas aeruginosa.

Referências:

1 BHATE, M. P. et al. Signal transduction in histidine kinases: insights from new structures. **Structure**, v. 23, n. 6, p. 981-994, June 2015.

2 MASSIE, J. P. et al. Quantification of high-specificity cyclic diguanylate signaling. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 109, n. 31, p. 12746-12751, July 2012.

3 VALENTINI, M.; FILLOUX, A. Biofilms and cyclic di-GMP (c-di-GMP) signaling: lessons from Pseudomonas aeruginosa and other bacteria. **Journal of Biological Chemistry**, v. 291, n. 24, p. 12547-12555, June 2016.

PG149

Protein conformational ensemble analyses based on differential geometry and information theory

SILVA NETO, A. M. da[1]; OLIVA, G.[1]; MONTALVÃO, R. W.[2]

amarinho@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Pontíficia Universidade Católica do Rio Grande do Sul - PUCRS

Protein dynamics is a key feature governing protein function and conformation ensembles are the ideal representation of a protein native state. (1) Obtain such ensembles is challenging, but there are promising alternatives based on experimental, computational and hybrid approach. (2) However, after such ensembles were obtained, the next challenge is how to get useful information which provide structural insights to a better understanding of protein function. For example, its useful for structural biologist to identify the most populated states or if specific protein regions are stable and etc.. For such analyses the measurements commonly used today present significant limitations. An alternative which is relatively less common is the usage of a differential geometry (DG) representation of backbones and information theory analyses. Here we present the Difflex, a package for analyses and clustering of protein conformations based on a DG representation. At the current version, Difflex is capable of local clustering, structural variability analyses. To demonstrate its possibles applications, we apply the method for intrinsically unstructured protein (cMyb-KIX) and a globular protein (Ubiquitin) ensembles determined by NMR-restrained Metadynamics.

Palavras-chave: Diferential geometry. Protein dynamics. Information theory.

Referências:

1 MA, B.; NUSSINOV, R. Protein dynamics: conformational footprints. **Nature Chemical Biology**, v. 12, n. 11, p. 890-891, 2016.

2 DE SIMONE, A. et al. Characterization of the interdomain motions in hen lysozyme using residual dipolar couplings as replica-averaged structural restraints in molecular dynamics simulations. **Biochemistry**, v. 52, n. 37, p. 6480-6486, 2013.

PG150

LLC-KBDM: an unsupervised machine learning approach for MRS data fitting

SILVA, D. M. D. D. da[1]; PAIVA, F. F.[1]

danilomendes@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The area under curve of Magnetic Resonance Spectroscopy (MRS) peaks or resonances in frequency domain can be used for measuring the concentration of the corresponding MR-visible compounds. For in vivo MRS data, this technique makes possible to determinate metabolite concentrations, which are useful for diagnosis of several diseases. For most signals, though, high degree of peak overlap may be present, which makes that conventional methods like peak integration become unpractical. In this case, it is necessary to take hands on more advanced methods. Krylov Basis Diagonalization Method (KBDM) (1) has been shown its robustness for solving the Harmonic Inversion Problem (HIP), which can be used to model an MRS signal into a combination of complex damped oscillations that become lorentzian functions combinations in the spectral domain. KBDM can be used to make parameter estimations of each signal component. These parameters are composed by the amplitude, frequency, transversal relaxation time and phase of each resonance of the Free Induction Decay (FID). However, KBDM was mainly used for solving high resolution problems with high Signal-to-Noise ratio (SNR). In other words, it was not developed to consider the effects of noise, which can be a problem for in vivo data. In this work, we present a method for circumventing noise effects of MRS data fitting through Krylov Basis Diagonalization Method. In order to achieve this, we aggregate multiple KBDM solutions for the same signal by using the centroid of each cluster detected by applying Density-based spatial clustering of applications with noise (DBSCAN) (2) algorithm in the feature space formed by the obtained parameters. As each resonance can be represented by a cluster with different structure, detect all genuine resonances by a single application of DBSCAN is not always possible. Thus, we proposed an iterative approach the detects higher density of points at first. Then, we create a signal with the detected resonances and apply DBSCAN on the residue formed by the subtraction of the input signal by the estimated one. We repeat the procedure until the residue achieves a defined threshold. This approach was compared with existing methods and has shown its superiority against Hankel-Lanczos Singular Value Decomposition (HLSVD) and HLSVD-PRO from jMRUI implementations for simulated signals with gaussian pseudo-noise. This method was called Line List Clustering Krylov Basis Diagonalization Method (LLC-KBDM) and its advantage over HLSVD and HLSVD-PROD increases as SNR decreases. We compared the methods using the quadratic error loss function and also the number of resonances estimations correctly obtained inside some precision thresholds.

Palavras-chave: MRS. KBDM. DBSCAN.

Referências:

1 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, Mar. 2001.

2 ESTER, M. et al. **A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise**. 1996. Available from: <https://www.aaai.org/Papers/KDD/1996/KDD96-037.pdf>. Accessible at: 02 Aug. 2017.

PG151

πFlowMR: um protótipo dataflow inspirado na Máquina Dataflow de Manchester

SILVA JUNIOR, J. T. da[1]; MATIAS, P.[2]; MARTINS, M. J.[1]; RUGGIERO, C. A.[1]

jtsjunior@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Desde a década de 60 existe um grande interesse acerca do ganho em desempenho de processamento computacional. Limitações físicas como a velocidade da luz e o princípio da incerteza, já não permitem que ganhos significativos possam ser obtidos somente com o aumento do *clock* do processador, como vimos acontecer nas últimas décadas. (1) O paralelismo é um paradigma muito explorado para esse fim. Diversos sistemas computacionais controlados por dados (*data-driven*) foram analisados a fim de obter esse paralelismo em nível de organização e arquitetura de computadores. A empresa americana **Intel** possui em seu catálogo de produtos comerciais processadores com mais de 50 núcleos físicos em um único *chip* (*Xeon Phi*, arquitetura *MIC*), oferecida conjuntamente com uma distribuição Linux, específica para o controle de todo esse potencial de computação paralela. Talvez um modelo computacional **MIMD** (Múltiplas Instruções, Múltiplos Dados) não convencional possa ser uma alternativa mais viável para o controle dessa grande quantidade de núcleos de processamento, ao invés de deixar a cargo do sistema operacional, ou do programador controlá-los explicitamente, como é feito no modelo de **Von Neumann** ainda utilizado nos dias atuais. (2) O **Dataflow** é uma técnica utilizada para sistemas computacionais controlados por dados, para especificar programas no formato de um grafo bidimensional: Instruções que podem ser executadas paralelamente são dispostas lado-a-lado e instruções que podem ser executadas sequencialmente são dispostas uma abaixo da outra. (3) O objetivo desse trabalho é seguir o desenvolvimento do protótipo intitulado como π**FlowMR**, desenvolvido no Instituto de Física de São Carlos. Esse protótipo foi desenvolvido com base na arquitetura da Máquina Dataflow de Manchester (**MDFM**), um processador que utiliza o paradigma do **Dataflow** e que já possui uma extensa referência na literatura, com isso, fornecendo um ponto de partida muito bem estabelecido. Uma das principais características da π**FlowMR** é seu caráter dinâmico, marcado pela utilização de um rótulo chamado Nome de Ativação, que permite a reutilização de informações para a execução paralela de operações como laços e recursividade por exemplo. A **MDFM** possui um formato bastante modular, onde cada módulo atua como um estágio de um *pipeline* e as fichas executadas nessa estrutura geram novas fichas subsequente à ela. Dessa forma, por apresentar esse caráter circular, a estrutura da **MDFM** é comumente chamada de anel. Para a π**FlowMR**, bem como o era na **MDFM**, existe uma limitação para a quantidade de unidades funcionais ativas na estrutura da máquina. Na π**FlowMR**, essa limitação se dá pela quantidade de unidades lógicas presentes nas *FPGAs* utilizadas para a composição da estrutura. Com isso, o presente projeto pretende utilizar o anel constituído na π**FlowMR** como uma unidade da nova estrutura, que irá disponibilizar diversas dessas unidades interligadas entre as suas vizinhas, dessa forma, garantindo um aumento considerável na quantidade de unidades funcionais ativas para a execução de programas.

Palavras-chave: Dataflow. Bluespec. MDFM.

Referências:

1 KISH, L. B. End of Moore's law: thermal (noise) death of integration in micro and nano electronics. **Physics Letters A**, v. 305, n. 3-4, p. 144-149, 2002.

2 DENNIS, J. B. Data flow supercomputers. **IEEE Computer**, v. 13, n. 11, p. 48-56, 1980.

3 GURD, J. R.; KIRKHAM, C. C.; WATSON, I. The Manchester prototype dataflow computer. **Communications of the ACM**, v. 28, n. 1, p. 34-52, 1985.

PG152

Dynamics of epidemics with awareness in multiplex networks

SILVA, P. C. V. da[1]; RODRIGUES, F. A.[2].

paulo.pc.vs@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

The diversity of interactions in real complex systems represent a challenge for modeling such systems with dynamical processes. Multiplex networks are the most powerful tool to take this diversity into account, and for this reason they have been attracting research efforts in the last years. (1) Recent studies are trying to understand the influence of awareness in epidemic models, by considering that the individuals (nodes of a network) can avoid contagion when aware of a certain disease. These models are simulated in two-layer multiplexes, with one layer for the spreading of the disease and the other for the spreading of the information about the disease. We present an extension of previous works (2), by proposing a discrete-time model with an alternation parameter that controls the relative time scales of epidemic and information spreading. We also consider the lost of interest in propagating the information by the nodes. The disease spreads according to a Susceptible-Infected-Susceptible model, whereas the information propagates according to a Maki-Thomson Unaware-Aware-Stifler-Unaware model. Nodes can become aware either by getting informed by a neighbor at the informational layer or by being infected and becoming self-aware of their own disease. Aware nodes reduce their contagion probability by an adjustable factor, the immunization parameter. We apply a Microscopic Markov-Chain Approach (MMCA) to predict the number of infected, aware and stifler nodes at long times, and analyze how these numbers depend on the disease transmission probability and other parameters of the model. Our first gathered results confirm the self-consistency of the model. By varying the ratio of time scales of the epidemic and informational processes, we found that a slower scale for the information spreading is more effective in reducing the stationary number of infected nodes, although the threshold for epidemic onset is unchanged. We also include degree correlations both inside and between the layers, and study the effects of such correlations on the propagation. Our first findings are in agreement with previous works performed by our group and collaborators (3) with a simpler model. Future results with our new model could help on the understanding of the dynamics between interacting spreading processes, as well as the influence of the relative time scales of the processes. Furthermore, some findings may give us an insight about the influence of information for real disease dynamics in society.

Palavras-chave: Multiplex networks. Epidemic model. Complex systems.

Referências:

1 KIVELÄ, M. et al. Multilayer networks. **Journal of Complex Networks**, v. 2, n. 3, p. 203-271, 2014.

2 GRANELL, C.; GOMEZ, S.; ARENAS, A. Competing spreading processes on multiplex networks: Awareness and epidemics. **Physical Review E**, v. 90, n. 1, p. 012808, 2014.

3 ARRUDA, G. F. et al. On degree-degree correlations in multilayer networks. **Physica D:** nonlinear phenomena, v. 323, n. 1, p. 5-11, 2016.onlinear phenomena, v. 323, n. 1, p. 5-11, 2016.

PG153

Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos em regime turbulento

SMAIRA, A. de F.[1]; TELLES, G. D.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

andre.smaira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Nesse trabalho apresentamos e discutimos os resultados e propriedades de turbulência em condensados de Bose-Einstein (1) adquiridas de imagens de tempo de voo processadas usando algoritmos complexos capazes de extrair informações relevantes das flutuações de densidade atômica regularmente observada nesse tipo de amostra. (2) Baseando-nos em processamento avançado somos capazes de ir além dos resultados padrões, já apresentados, e determinar mapas de "momentum"(3), flutuações de densidade e correlações, propriedades de vórtices, assim como desenvolver outros tipos de análise, para ajudar em uma melhor caracterização e entendimento dos regimes turbulentos e outras propriedades relacionadas. Nesse cenário, estamos desenvolvendo uma biblioteca de processamento especializada para ser usada nas análises e na determinação de propriedades não triviais, que são essenciais para o futuro da pesquisa de gases turbulentos degenerados.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Física atômica. Átomos frios.

Referências:

1 WHITE, A. C.; ANDERSON, B. P.; BAGNATO, V. S. Vortices and turbulence in trapped atomic condensates. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 111, suppl. 1, p. 4719-4726, 2014.

2 TAVARES, P. E. S. **Excitations in Bose-Einstein condensates: collectivemodes, quantum turbulence and matter wave statistics**. 2016. 134 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

3 BAGNATO, G. D. G. **Determinação da distribuição de momento em superfluidos atômicos aprisionados: regimes turbulento e não turbulento**. 2013. 113 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

PG154

Efeitos coletivos nos processos de interação radiação-matéria: superátomos, superradiância e superabsorção

SOARES, P. M. S. B.[1]; MOUSSA, M. H. Y.[1]

pmsoares02@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Conceitualmente, todo sistema fı´sico com caracterı´sticas de superradiância (1) pode apresentar o fenômeno oposto: superabsorção. A tendência natural é que as excitações presentes na amostra sejam transferidas para os infinitos graus de liberdade do reservatório térmico num processo irreversı´vel. Logo, explorar a absorção de excitações térmicas é uma tarefa difı´cil, já que devido às flutuações do vácuo, a emissão sempre predomina durante a dinâmica incoerente. Os estados de Dicke, apropriados para descrevê-la, formam uma escada de nı´veis energéticos igualmente espaçados pelos quais o sistema atômico transita. Entretanto, nenhuma das transições nela existentes é privilegiada pelos modos do reservatório, impossibilitando que este acesse apenas uma delas em particular. Num trabalho recente, apresentado em 2014 (2), K. D. B. Higgins e colaboradores elaboraram um mecanismo de controle incoerente de uma dada transição coletiva, viabilizando a superabsorção. Ao posicionar ı´ons numa estrutura circular, introduz-se à dinâmica livre a interação dipolo-dipolo entre primeiros vizinhos, que de forma perturbativa discrimina cada uma das transições. Somado à isso, exige-se um reservatório térmico de espectro estreito e centrado na frequência que favorece a transição alvo, evitando-se que as demais sejam acionadas. Basta ajustar a temperatura do reservatório para a dada transição, e efetivamente produzir um sistema de dois nı´veis que superabsorve excitações térmicas. Este resultado amplia os conhecimentos sobre a superradiância e fornece novas perspectivas. A seletividade de estados de Fock (3), possui notória analogia. Obtida por meio da engenharia de interações, a seletividade consiste em restringir o sub-espaço dos estados do campo, de forma que apenas dois consecutivos apresentem população não nula. Aplicado aos estados de Dicke, este conceito viabilizaria o super-átomo: um sistema de dois nı´veis efetivo que preserva as caracterı´sticas coletivas de origem, e interage com o modo do campo de radiação. Já o trabalho sobre geração de estados de Fock estacionários via engenharia de reservatórios, tornaria-se o ponto de partida para a proteção de emaranhados coletivos. Como na superradiância e na superabsorção, em que uma amostra atômica comporta-se como um único átomo via correlação entre seus momentos de dipolo, o objetivo do projeto é a engenharia de um Hamiltoniano de interação entre uma amostra atômica e um modo do campo de radiação em que a amostra atue como um único átomo, ou por assim dizer, um superátomo.

Palavras-chave: Superradiância. Engenharia de reservatórios. Engenharia de interações.

Referências:

1 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review Letters**, v. 93, n. 1, p. 99-110, 1954.

2 HIGGINS, K. D. B. et al. Superabsorption of light via quantum engineering. **Nature Communications**, v. 5, p. 4705-1-4705-7, 2014. doi: 10.1038/ncomms5705.

3 PRADO, F. O. et al. Engineering selective linear and nonlinear Jaynes-Cummings interactions and applications. **Journal of Physics B,** v. 46, n. 20, p. 205501-1-205501-10, 2013.

PG155

Organic MIS and EIS devices based on Spin-coated P3HT-PVP-CMC films for glucose sensing.

SOUSA, M. A. M.[1]; RAYMUNDO-PEREIRA, P. A.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de[1]

marcos.moura.fis@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Electrolyte-Insulator-Semiconductor (EIS) capacitors based on silicon have been largely studied in biosensing (1), and there is now interest in organic field-effect devices (OFEDs) because of their mechanical flexibility and low-cost manufacturing. (2) In this study, we fabricated all- organic Metal-Insulator-Semiconductor (MIS) and EIS devices using poly(3-hexylthiophene) (P3HT) and poly(4-vinylphenol) (PVP) as semiconductor and insulator layers, respectively. This structure was spin-coated on indium-tin-oxide (ITO) substrates followed by thermal treatment to eliminate solvents. In MIS devices, the ITO contacts were designed by photolithography and over these final devices a 100 nm gold layer was deposited by vacuum thermal evaporation with deposition speed of 0.5 Å/s. A layer of carboxymethyl chitosan (CMC) was deposited by casting or spin coating in order to assist in the immobilization of glucose oxidase due to the carboxylic groups. Capacitance-voltage (C-V) measurements in phosphate buffered saline (PBS) were performed using a Solartron SI 1260. The MIS data analysis provided important information about depletion capacitance and flat-band voltage of such devices. Furthermore, the glucose oxidase immobilized on the EIS device was successfully used for detection of glucose. The approach introduced here is interesting for OFEDs fabrication since p-type semiconductors can be obtained in a very simple fashion.

Palavras-chave: Organic field-effect devices. Electrolyte-insulator-semiconductor capacitors. Glucose biosensor.

Referências:

1 SOUSA, M. A. M. et al. Determining the optimized layer-by-layer film architecture with dendrimer/carbon nanotubes for field-effect sensors. **IEEE Sensors Journal**, v. 17, n. 6, p. 1735-1740, 2017.

2 LIN, T.-W; KEKUDA, D.; CHU, C.-W. Label-free detection of DNA using novel organic-based electrolyte-insulator-semiconductor. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 25, n. 12, p. 2706-2710, 2010.

PG156

Análise do potencial de força média (PMF) para o ajuste induzido da Endoglucanase de Bacillus licheniformis.

SOUSA, S. C.[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]

stheffy.colmanetti@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A conversão da biomassa vegetal em novas matérias-primas é uma abordagem que se enquadra no contexto de desenvolvimento sustentável ou mesmo de química verde. Um desafio nesta área envolve a descoberta ou a engenharia de enzimas com atividade ótima sobre os componentes da biomassa. É sabido que a enzima endoglucanase produzida pela bactéria *Bacillus licheniformis* realiza o processo de hidrólise da celulose em açúcares mais simples e, recentemente, a sua estrutura foi resolvida em nosso grupo de pesquisa. (1) No entanto, as propriedade dinâmicas dessa biomolécula e o seu perfil energético, ainda não foram completamente compreendidos. Podemos compreender as propriedades estruturais e dinâmicas dessa macromolécula através da reconstrução do potencial de força média (PMF) em função da movimentação dos domínios da enzima na presença e ausência do substrato utilizando métodos de amostragem ampliada em dinâmica molecular, como a metadinâmica (2) e a Gaussian-Accelerated Molecular Dynamics (GaMD). (3) As estruturas da hidrolase de glicosídeos da *Bacillus licheniformis* (BlCel5B) (1) foram obtidas do PDB, o substrato (celooctaose) foi modelado e parametrizado usando o campo de força GLYCAM06. As simulações foram feitas utilizando o pacote de softwares AMBER utilizando o campo de força FF14SB. Realizamos duas simulações de equilíbrio para o sistema apo e para o complexo com substrato, 1 s de simulação por sistema. A análise das componentes principais (PCA) demonstrou um indicativo de abertura e fechamento da proteína. Uma segunda simulação foi realizada utilizando a técnica de GaMD para amostrar eventos mais raros para o sistema apo e uma PMF foi obtida para esse. Os estudos referentes a metadinâmica para o sistema sem ligante estão em andamento, e os próximos passos incluem a aplicação de GaMD para o sistema proteína-substrato.

Palavras-chave: Biomassa vegetal. Endoglucanase Bacteriana Bacillus licheniformis. Perfil energético. Dinâmica molecular. Metadinâmica. GaMD.

Referências:

1 LIBERATO, M. V et al. Molecular characterization of a family 5 glycoside hydrolase suggests an induced-fit enzymatic mechanism. **Scientific Reports**, v. 6, n. 23473, 2016.doi:10.1038/srep23473.

2 BARDUCCI, A.; BONOMI, M.; PARRINELLO, M. Metadynamics. **WIRES Computational Molecular Science**, v. 1, n. 5, p. 826–843, 2011.

3 MIAO, Y.; FEHER, V. A.; MCCAMMON, J. A. Gaussian accelerated molecular dynamics: unconstrained enhanced sampling and free energy calculation. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 11, n. 8, p. 3584–3595, 2015.

PG157

Desenvolvimento de emulador do espectrômetro digital do CIERMag

SOUZA, P. V. B. D. de[1]; VIDOTO, E. L. G.[1]; MARTINS, M. J.[1]; TANNÚS, A.[1]

pedrovbdsouza@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos

A Ressonância Magnética Nuclear (RM) é uma técnica bastante importante e versátil, pois permite que, de forma não invasiva, sejam observadas e analisadas as substâncias presentes no corpo de teste, seja ele uma amostra inanimada ou um ser vivo. Contudo, a técnica é bastante complexa, necessitando de equipamento de alta tecnologia e nenhum dos equipamentos comerciais disponíveis atendem idealmente a área de Pesquisa que desenvolve novos métodos e sequências de pulsos. Diante deste contexto, o Grupo de Pesquisas do Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética (CIERMag) desenvolveu um Espectrômetro em FPGA (1) voltado para pesquisas científicas, que pode ser configurado para operar, idealmente, em qualquer experimento de RMN e também pode ser atualizado para auxiliar o desenvolvimento de novas sequências de pulsos. O objetivo deste trabalho é desenvolver um emulador para o Espectrômetro com as mesmas características e arquitetura, de modo que possa substituir completamente o equipamento físico. Deste modo, será possível realizar testes tanto dos softwares presentes no ambiente de operação do Espectrômetro, quanto das novas sequências de pulsos. O emulador oferecerá recursos de trabalho que não são acessíveis dentro do hardware como visualização da memória e dos registradores dos processadores, acompanhamento passo-a-passo da execução dos códigos dos processadores, monitorar as saídas e formas de onda gerados.

Palavras-chave: Emulador. Espectrômetro de Ressonância Magnética.

Referências:

1 SILVA, D. M. D. D. et al. Subsistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados do Espectrômetro Digital de RM: ToRM console.**Revista Brasileira de Física Médica**, v. 7, n. 2, p. 35-40, 2013.

PG158

Advantage of using nonlinear ellipse rotation effect to determine orientational nonlinearities: observation of an 2.25 enhancement factor

SOUZA, T. G. B. de[1]; BARBANO, E. C.[1]; ZILIO, S. C.[1]; MISOGUTI, L.superscript1

tiago.gualberto.souza@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Material nonlinear self-induced effects are usually expressed by nonlinear refractive index (n_2). Several parameters could be determinant in order to measure its value, such as pulse duration, light polarization, the physical mechanism of the nonlinear signal, among others. The tensor nature of third-order susceptibilities ($\chi^{(3)}$) also must be considered, for even in isotropic media the nonlinear optical properties are anisotropic, thereby it was taken into account the two independent tensor components (χ_{1122} and χ_{1221}) which rule the samples nonlinearities. (1) As a consequence different coefficients could be access, depending on the experiment employed. Two techniques were applied, Z-scan which measures assesses , and nonlinear ellipse rotation (*NER*) which assesses *B*. (2) In this way, complementary characteristics of samples nonlinearities were explored. Then, two samples were probed using both techniques, *ZnSe* window and CS_2, were the former majority presented nonresonant electronic (*NE*) contribution and the latter predominantly molecular orientation (*MO*). Both experiments were performed using a Q-switched and mode-locked Nd:YAG laser (1064 nm; 100 ps), emitting a package of 30 pulses at 400 Hz of repetition rate. As predicted, the results measurements of *ZnSe* and CS_2, have shown distinct amplitude range. Therefore, demonstrating an enhancement factor of 2.25 when one considers the amplitude range of *B* values in comparison to n_2 for molecular orientation nonlinearity. (3) As the *NER* signal can be measured with higher sensitivity than Z-SCAN, *MO* nonlinearities could be obtained more accurately.

Palavras-chave: Nonlinear refractive index. Nonlinear ellipse rotation.

Referências:

1 BOYD, R. W. **Nonlinear optics**. 3rd ed. San Diego: Academic Press, 2008.

2 MIGUEZ, M. L. et al. Accurate measurement of nonlinear ellipse rotation using a phase-sensitive method. **Optics Express**, v. 22, n. 21, p. 25530-25538, 2014.

3 BARBANO, E. C. et al. Comparative study of electronic and orientational nonlinear refractive indices with nonlinear ellipse rotation measurements. **Journal of the Optical Society America B**, v. 33, n. 12, p. E40-E44, 2016.

PG159

Estudos de modelagem molecular aplicados ao planejamento de candidatos a novos fármacos antichagásicos

SOUZA, A. S. de[1]; OLIVEIRA, M. T.[2]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

anacletosilvadesouza@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química de São Carlos - USP

O mal de Chagas é uma doença tropical negligenciada causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*. Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS), cerca de 7 milhões de pessoas estão infectadas pelo parasita (causa de mortes anual por volta de 10 mil) e 80 milhões moram em áreas de risco. (1) Essa doença possui duas fases: as fases, aguda e crônica. A fase aguda é definida pela alta taxa de parasitemia no sangue e geralmente possui sintomatologia não específica (febre, dor de cabeça, diarreia, náusea e vômito). A fase crônica, entretanto, é caracterizada pela baixa carga parasitária no sangue do hospedeiro. Essa fase é assintomática, porém após 10-20 anos, surgem os sintomas característicos da doença na sua forma grave (cardiomegalia, megacólon e megaesôfago). (1) A farmacoterapia disponível consiste em dois fármacos: o benzonidazol e o nifurtimox. Esses fármacos, porém são inseguros e limitados (farmacocinética desfavorável). Portanto, é urgente o investimento em P&D para descoberta de fármacos, que sejam eficientes e seguros para a terapia da doença. Várias abordagens são utilizadas para o planejamento de novos compostos: os métodos baseados na estrutura do ligante (LBDD, do inglês *ligand-based drug design*) e na estrutura do receptor (SBDD, do inglês *structure-based drug design*). O método LBDD se baseia nas informações dos compostos bioativos para gerar os modelos das relações quantitativas entre estrutura e atividade (QSAR, do inglês *quantitative structure-activity relationships*). O método SBDD, utiliza a informação da macromolécula para compreender os fenômenos de reconhecimento entre ligante e enzima-alvo. A cruzaína é uma cisteíno protease membro na classe C1 da família da papaína e está presente nas três formas morfológicas do *T. cruzi*. Ela é um alvo validado com base em ensaios bioquímicos e estudos em modelo animal e está envolvida em diversos eventos biológicos do parasita (nutrição, reprodução, invasão, reconhecimento, defesa e evasão). A cruzaína possui quatro subsítios: S1 (Gln19, Gly23, Cys25 e Ser64), S2 (Met68, Ala138, Leu160, Gly163 e Glu208), S3 (Ser61, Ser64, Gly65, Gly66 e Leu67) e S1' (Asp161, His162, Asn182 e Trp184). O resíduo Glu208 interage com resíduos de aminoácidos positivos possibilitando acomodar resíduos hidrofóbicos em S2; o Trp184 é conservado e garante a especificidade de S1'. O sítio catalítico é constituído pela tríade catalítica Asn182, Cys25 e His162 (esses últimos formam o complexo iônico tiolato-imidazólico, importante na catálise). (2) Vários inibidores não covalentes foram testados frente a cruzaína. Ferreira e colaboradores desenvolveram uma série de inibidores não covalentes da cruzaína e obtiveram o composto líder oxadiazólico (IC50 = 200 nM). (3) No presente estudo, foi desenvolvido um farmacofórico e gerado o modelo QSAR 3D a partir dos inibidores derivados de oxadiazóis (r^2pred (CoMFA) = 0,82). A integração do modelo 3D e as estratégias de ancoramento molecular possibilitaram mapear os subsítios da cruzaína (incluindo, ligação de halogênio e as interações do tipo - e CH-) e revelaram que o subsítio S1 não foi explorado nessa série. Na próxima etapa do trabalho, aplicaremos o modelo como filtro em triagens virtuais de larga escala

(ZINC database) e determinaremos as predições dos novos inibidores.

Palavras-chave: Cruzaína. Doença de Chagas. Farmacóforo.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Chagas disease (American trypanosomiasis)**. Disponível em: <http://www.who.int/chagas/epidemiology/en/>. Acesso em: 31 ago. 2017.

2 CAZZULO, J. J.; STOKA, V.; TURK, V. The major cysteine proteinase of Trypanosoma cruzi: a valid target for chemotherapy of Chagas disease. **Current Pharmaceutical Design**, v. 7, n. 12, p. 1143 -1156, 2001.

3 FERREIRA, R. S. et al. Divergent modes of enzyme inhibition in a homologous structure: activity series. **Journal of Medicinal Chemistry Letters**, v. 52, n. 16, p. 5005-5008, 2009.

PG160

Screening of the open source Malaria Box reveals new inhibitors of Plasmodium falciparum enolase as early lead compounds

SOUZA, G. E.[1] ; AGUIAR, A. C. C. A.[1] ; SOUZA, L. R. F. de[2] ; MALUF, F. V.[1] ; GARCIA, C. R.[3] ; OLIVA, G.[1] ; GUIDO, R. V. C.[1]

guilherme.eduardo.souza@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Química - UFG - Campus Catalão

[3] Instituto de Biociências - USP

Introduction: Malaria is a global public health problem with high mortality rates. (1) In this scenario, new therapeutic alternatives with innovative action mechanism are needed. Intra-erythrocytic stages of *Plasmodium falciparum* lack the functional tricarboxylic acid cycle and rely solely on glycolysis for their energy requirements. Enolase catalyzes the reversible interconversion of 2-phosphoglyceric acid to phosphoenolpyruvic acid. *P. falciparum* enolase (Pf-eno) is an attractive and validated new target for antimalarial drug development. Medicines for Malaria Venture (MMV) has assembled a collection of 400 diverse compounds with in vitro activity against *P. falciparum* ("Malaria Box"). The collection is available upon request free of charge to the scientific community for screening purposes. Objectives: The aim of this work was screening the Malaria box against Pf-eno to discover new inhibitors as lead candidates. Material and methods: The Pf-eno inhibitory activity of Malaria Box compounds was evaluated by a standardized spectrophotometric method. (2) A primary screening for Pf-eno inhibitors was conducted and the most promising compounds were selected to IC_{50} value evaluation. Moreover, the in vitro activity of the Pf-eno inhibitors against the whole parasite was assessed (isolated and combined with artesunate). Results and discussion: In the primary screening, 10 out 400 compounds were identified as Pf-eno inhibitors (% of inhibition $>$ 80 @ 50 μM). The compounds belong to several chemical classes (e.g., benzimidazoles, quinolines). The determined IC_{50} values were in the low micromolar range (3 to 20 μM). The in vitro activity against *P. falciparum* (3D7 strain) indicated that the compounds are nanomolar inhibitors with additive profile when combined with artesunate. (3) Conclusions: Ten novel compounds were identified as Pf-eno inhibitors with in vitro activity against *P. falciparum*. Additionally, some compounds showed additive effects when assessed in combination with artesunate. Our data suggest that the Pf-eno inhibitors can be investigated as novel lead candidates for malaria.

Palavras-chave: Malaria. Malaria Box. Enolase.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World malaria report 2015**. Available from: <http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/200018/1/9789241565158_eng.pdf?ua=1>. Accessible at: 23

Aug. 2017.

2 TRAGER, W.; JENSEN, J. B. Human malaria parasites in continuous culture. **Science**, v. 193, n. 4254, p. 673-675, 1976.

3 BERENBAUM, M. C. A method for testing for synergy with any number of agents. **Journal of Infectious Diseases**, v. 137, n. 2, p. 122-130, 1978.

PG161

Aspectos supramoleculares em dois sais 1:1 de 5-Fluorocitosina com os ácidos inorgânicos Bromídrico e Metanossulfônico

SOUZA, M. da S.[1]; SILVA, C. C. P. da[1]; ALMEIDA, L. R. de[1]; DINIZ, L. F.[1]

msouza@ifsc.usp.br

ELLENA, Javier [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A 5-Fluorocitosina (5-FC) é um pró-fármaco de Classe I, segundo o Sistema de Classificação Biofarmacêutico (SCB), apresentando alta solubilidade e permeabilidade. Ela tem sido amplamente utilizada para tratar infecções fúngicas, principalmente as causadas pelas espécies Candida albicans e Criptococcus neoformans. (1) Recentemente foi descoberto que este insumo farmacêutico ativo (IFA) também pode exercer extraordinária atividade antineoplásica em pacientes submetidos à terapia gênica. Entretanto, apesar do seu extensivo uso, este IFA apresenta instabilidade física e sofre transição da fase anidra para a monohidratada em ambientes com elevada umidade relativa. Tal fato não é favorável durante o processo de manufatura bem como o de estocagem de fármacos. Dentro deste panorama, a formação de sais é uma das alternativas diretas para contornar este inconveniente. (2) O presente trabalho relata duas estruturas (estequiometria 1:1) de 5-FC com os coformadores inorgânicos ácido Bromídrico e Metanossulfônico (intitulados de 5FC-Br e 5FC-Mes, respectivamente). Estas novas formas sólidas multicomponentes foram preparadas via síntese supramolecular pelo método de evaporação de solvente e os cristais foram estruturalmente caracterizados por difração de raios X por monocristal. A análise das interações intermoleculares foi realizada pela superfície de Hirshfeld. Curiosamente, apenas 11,7% das estruturas de 5-FC depositadas no Cambridge Strucutural Databasase (3) são de sais com coformadores inorgânicos. Assim, relatar e compreender os padrões supramoleculares destes sais pode ser útil para uma seleção mais segura de formas cristalinas durante estudos de pré-formulação farmacêutica. 5FC-Br e 5FC-Mes cristalizaram com um par iônico independente na unidade assimétrica (Z' = 1), os quais são estabilizados por uma ligação de hidrogênio assistida por carga envolvendo o átomo N3 do anel pirimidínico da 5-FC gerando um sínton do tipo: N3+···ânion-. Espera-se que, assim como os sais até então reportados, haja um ganho na estabilidade evitando a hidratação (transição de fase) e, consequentemente, limitações farmacocinéticas, tal como biodisponibilidade variada.

Palavras-chave: 5-Fluorocitosina. Insumo farmacêutico ativo. Ácidos inorgânicos. Sais farmacêuticos. Difração de raios X. Estrutura cristalina.

Referências:

1 WANG, L. et al .2 : 1 5-Fluorocytosine–acesulfame CAB cocrystal and 1 : 1 5-fluorocytosine–acesulfame salt hydrate with enhanced stability against hydration. **CrystEngComm**, v.16,p.8537-8545.2014.

2 PERUMALLA, S.; PEDIREDDI, V.; SUN, C. Design,synthesis, and characterization of new

5-fluorecytosine salts. **Molecular Pharmaceutics**, v. 10, n.6, p.2462–2466,2013.

3 GROOM, C. R. et al. The Cambridge Structure Database. **Acta Crystallographica B**, v.72, pt.2, n.171–179,2016.

PG162

A high throughput, inexpensive and open-source biorreactor for optimization of recombinant protein expression.

STELMASTCHUK, L. B. F.[1]; THIEMANN, O. H.[1]

laure@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Automation allied to a miniaturized and high throughput format for protein production allows researchers to conduct high complexity experiments for screening expression conditions as it handles a number of different samples simultaneously. (1) For structural biology studies, establishing the conditions for obtaining large ammounts of correctly folded protein is still a time consuming process. Although various methods are available nowadays, the equipment required for small volume-parallel processing of expression conditions is expensive and isolated to facilities where it must be operated by trained personal. In this context, the development of open-source hardware/software tools applied to biotechnology can improve research conditions at low-cost and with relatively uncomplicated approaches. This study will report an inexpensive customizable device for high throughput protein expression making use of 3D printing techniques and open-source software/hardware. The prototype developed will be capable of monitoring and adjusting bacterial culture conditions such as temperature, pH, oxigenation, and cell growth (A 600) of a customized number of small volume samples. The programmed addition of reactants will be performed by the device, providing the user with an option to slightly change the original experiment's setup. All the features will be controlled by an Arduino Mega board (Atmega2560 microcontroller), programmed and monitored using Arduino IDE. Structural components of the device will be modeled on CAD softwares and 3D printed using a RepRap cartesian 3D printer. (2) Assembling automated and customized devices using open-source software/hardware provides the opportunity of using high throughput methods even in small laboratories and, therefore, our findings can greatly facilitate the studies and reduce the costs of projects involving protein expression.

Palavras-chave: Protein expression. Free software/hardware. Laboratory automation.

Referências:

1 DUETZ, W.A. Microtiter plates as mini-bioreactors: miniaturization of fermentation methods. **Trends Microbiology**, v.15, n.10,p.469–75,2007.

2 WITTBRODT, B.T. et al. Life-cycle economic analysis of distributed manufacturing with open-source 3-D printers. **Mechatronics, v.**23, n.6, p.713–26, 2013.

PG163

Aplicações de Ressonância Magnética Nuclear ao estudo de meios porosos utilizando técnicas de polarização nuclear dinâmica

SÁ, A. A. de C.[1]; BONAGAMBA, T. J.[1]

alessandro.sa@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Informações sobre porosidade de rochas reservatório e transporte de fluidos em seu interior são fundamentais para a indústria de petróleo, a qual recorre a várias técnicas para obtê-las, dentre as quais aquelas baseadas em Ressonância Magnética Nuclear (RMN) (1), em especial métodos de relaxometria e difusometria. (2) A partir da observação das taxas de decaimento dos sinais de RMN devido à relaxação transversal (T_2), à longitudinal (T_1) ou à descoerência induzida por difusão (D) é possível obter, por meio desses métodos, informações sobre o tamanho e distribuição dos poros de uma amostra, além da composição de suas paredes e dos coeficientes de difusão de fluidos da mesma. Esses métodos têm ainda a vantagem de não requerer campos magnéticos altos e funcionam mesmo nos casos em que os campos locais na região da amostra apresentam inomogeneidades devido à suscetibilidade magnética desta ou a limitações na instrumentação. As principais limitações dessas técnicas, no entanto, são a baixa relação sinal-ruído inerente ao fenômeno da RMN e o contraste entre os sinais com diferentes tempos de relaxação provenientes da amostra. Neste último caso, o problema de distinguir sinais com diferentes taxas de decaimento é matematicamente mal determinado e se torna particularmente difícil de resolver quando as amplitudes dos diferentes sinais se tornam comparáveis à do ruído. Para superar essas limitações, a proposta deste trabalho consiste no uso de Polarização Nuclear Dinâmica (PND) para ampliação do sinal de RMN proveniente de rochas reservatório utilizando campos baixos. A PND (3) é uma técnica que permite a transferência de polarização de spins de elétrons desemparelhados presentes num radical livre para os spins de núcleos próximos, amplificando consideravelmente (até duas ordens de magnitude, no caso de radicais livres dissolvidos em água) o sinal de RMN obtido desses últimos. Neste trabalho, isto é feito por meio da irradiação, na presença de um campo magnético estático B_0, de um pulso de radiofrequência na faixa de UHF em uma amostra saturada com uma solução contendo o radical livre e a posterior captação do sinal de RMN na frequência de Larmor dos núcleos de ^1H presentes na água. Atualmente estão em andamento estudos envolvendo soluções de diferentes concentrações do radical livre TEMPO (2,2,6,6-tetrametil-1-piperidiniloxil) irradiadas com pulsos de diferentes diferentes potências buscando obter a máxima ampliação possível dos sinais de RMN para posterior combinação desta técnica com aquelas de relaxometria e difusometria .

Palavras-chave: Polarização nuclear dinâmica . RMN. Difusometria. Relaxometria.

Referências:

1 DUNN, K.J.; BERGAMAN, D. J. ; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance**: petrophysical and logging applications, New York: Pergamon Press, 2002.v.32.

2 KIMMICH, R .**NMR:** tomography, diffusometry, relaxometry. New York: Springer Science & Business Media, 2012.

3 FRANCK, J. M.; KAUSIK, R; HAN, S. Overhauser dynamic nuclear polarization-enhanced NMR relaxometry.**Microporous Mesoporous Materials**, v.178, p.113–118, 2013.doi:10.1016/j.micromeso.2013.04.019

PG164

Radial heterostructured GaAs/AlGaAs nanowires

TAVARES, B.[1]; TITO, M. A.[1]; ARAKAKI, H.[1]; SOUZA, C. A.[1]; PUSEP, Y. A.[1]

belarmino@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Photoluminescence was studied in GaAs/AlGaAs NWs with different radial heterostructures. We demonstrated that manipulation of the emission energy may be achieved by appropriate choice of the shell structure. Structural characterization of the nanowires (NW) was performed with transmittance electron microscopy, photoluminescence and Raman scattering measurements, which unambiguously manifest to the presence of segments crystallized in zinc-blende and wurtzite phases. Four observed photoluminescence lines are assigned to the radiative recombination of photoexcited electrons confined in the center of the GaAs core and at the heteroboundary between the outer GaAs shell and the inner AlGaAs one with the holes localized at the heteroboundary between the core and the inner AlGaAs shell; both recombinations take place in zinc-blende as well as in wurtzite phases. One additional photoluminescence line is attributed to the spatially indirect recombination between the electrons in zinc-blende and the holes in wurtzite phases. A simple model, based on representation of the valence band structure using two levels, accounts well for the observed temperature dependence of the integrated photoluminescence intensities. A red shift of the recombination time maximum with respect to the photoluminescence peak energy was demonstrated in doped NWs. The proposed double shell structure with tunneling transparent inner shell sets conditions for easy control of the emission energy of the heterostructured NWs. The results of this study are published in. (1-3) In addition, time-resolved photoluminescence is employed to study electron-hole dynamics.

Palavras-chave: Nanowires. Recombination. Photoluminescence.

Referências:

1 CAFACE, R. A. et al. Photoluminescence of radial heterostructured GaAs/AlGaAs/GaAs nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 113, n. 6, p. 064315-1-064315-4, 2013.

2 BARBOSA, B. G. et al. Manipulation of emission energy in GaAs/AlGaAs core-shell nanowires with radial heterostructure. **Journal of Applied Physics**, v. 115, n. 11, p. 114312-1-114312-5, 2014.

3 TITO, M. A. et al. Radial multiple quantum well GaAs/AlGaAs heterostructure formed in nanowires. **Superlattices and Microstructures**, v. 100, p. 918-923, Dec. 2016. doi: 10.1016/j.spmi.2016.10.048.

PG165

Geração de estados quânticos via engenharia dissipativa

TEIZEN, V. F.[1]; ROSSETTI, R. F.[1]; ARAUJO, H. S.[1]; OLIVEIRA NETO, F. de[1]; MORAES NETO, G. D. de[2]; MONTENEGRO, V.[3]; VERNEK, E.[2]; MOUSSA, M. H. Y.[1]

victorfernandesteizen@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - UFU

[3] Facultad de Física - Pontificia Universidad Catolica de Chile

A preparação de estados quânticos é essencial tanto para a ciência de informação quântica. Para efetuar tal procedimento, faz-se necessária a engenharia de interações (engenheria de hamiltonianos e engenharia de reservatórios - ou engenharia dissipativa), na qual o objetivo básico é o de controlar os estados obtidos, e (ou) contornar a decoerência que estados quânticos de um sistema de interesse sofrem sob o acoplamento com outro sistema (como um reservatório, por exemplo). No caso da engenharia de hamiltonianos usualmente submete-se um subsistema de interesse à ação o de um sistema auxiliar, gerando interações efetivas desejadas; no caso da engenharia dissipativa (1), é possível acoplar o sistema de interesse a um conjunto de sistemas auxiliares de forma a modificar as interações naturais que provocam a perda do caráter quântico dos estados desejados quando sob a ação o de determinado reservatório, assim atingindo, por exemplo, a proteção o de determinados estados quânticos. Para que os sistemas quânticos cujo controle experimental já é amplamente implementado e conhecido, usualmente, a interação o com a matéria (um número pequeno de átomos) muitas vezes ocorre com um único fóton (ou com números baixos de excitação o dos campos em questão). Dentre tais sistemas destacaremos dois: o sistema de eletrodinâmica quântica de cavidades e as cadeias iônicas aprisionadas.O primeiro trata-se de um sistema no qual uma cavidade de alto fator de qualidade sofre a passagem de um feixe atômico sujeito a diversos campos elétricos que possibilitam a realização o da engenharia de reservatórios; o segundo trata-se de um conjunto de íons (2) que são confinados a partir de diversos campos eletromagnéticos, sendo tal confinamento (quando alcançado) descrito efetivamente em termos de excitações vibracionais coletivas, cujas trocas de excitação o com os íons podem ser controladas. Nesse trabalho propomos a utilização (no contexto de cavidades) de uma técnica conhecida como seletividade (3) para geração o de uma fonte de único fóton (ou seja, estados próximos do de Fock $|1\rangle$ utilizando excitações pulsadas em determinado regime de parâmetros. Além disso, ainda tangendo cavidades, propomos também um protocolo para geração de um hamiltoniano efetivo não-linear a fim de implementar uma fonte laser não-linear. No que concerne cadeias iônicas, propomos um procedimento baseado na obtenção o de hamiltonianos não-lineares que são utilizados para construir Liouvilianos que resultam na proteção o de estados de Fock. Por fim, utilizamos uma cadeia de íons descrita por interação o de primeiros vizinhos para realizar uma engenharia de interações na qual os estados coletivos na descrição o de Jordan-Wigner são protegidos via bombeios construídos a fim de que apenas um dos estados do espectro do sistema de interesse seja excitado, suprimindo as outras excitações a fim de combater a inevitável ação o do ambiente sobre o sistema de interesse.

Palavras-chave: Proteção de estados. Engenharia de interações. Física do laser.

Referências:

1 POYATOS, J. F.; CIRAC, J. I.; ZOLLER, P. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 23, p. 4728-4731, 1996.

2 JAMES, D. F. V. Quantum dynamics of cold trapped ions with application to quantum computation. **Applied Physics B**, v. 66, n. 2, p. 181-190, 1998.

3 PRADO, F. O. et al. Steady Fock states via atomic reservoir. **Europhysics Letters**, v. 107, n. 1, p.13001-p1-13001-p6, 2014.

PG166

Gravitational wave emission from black holes pierced by cosmic strings

TEODORO, M. do C.[1]; HARTMANN, B.[1]

matheuscteodoro@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Both gravitational waves (GW) as well as black holes (BH) are predictions of Einstein's General Theory of Relativity (GR), which describes gravity in terms of the curvature of space-time. GW appear in the linear, i.e. weak limit of the field equations, while BH are non-linear solutions that possess very strong gravitational fields. Recent direct observations of gravitational waves by LIGO (1) showed that they came from the merge of two rotating black holes. Parameters of the black holes involved were measured by, besides other numerical analysis, the extracting the Quasi-Normal Modes (QNM) from the signal. QNM are the modes of oscillation of a dissipative system, and encrypt information about the source of the waves. With the advance of the technology and sensitivity of the detectors, an interesting perspective arises: the test of theoretical predictions for BH such as the No-hair conjuncture which states that astrophysical BH should be characterized by a small amount of parameters: mass, charge and angular momentum. We are interested in BH pierced by a cosmic string, which is a string-like object that is predicted to have formed in the very early universe through symmetry breaking phase transitions and the Kibble mechanism. (2) This kind of system (BH+Cosmic String) can both probe the no-hair conjuncture as well as provide information about the early universe through the cosmic string. In our presentation we shall show a modified perturbation theory of the Schwarzschild+String solution based on (3) and expose how to extract the quasi-normal modes in order to generate a well based theory for the further gravitational waves data analysis.

Palavras-chave: Black holes. Quasi-Normal Modes. Cosmic Strings.

Referências:

1 ABBOTT, B. P. et. al. Observation of gravitational waves from a binary black hole merger. **Physical Review Letters**, v. 166, n. 6, p. 061102-1-061102-16, 2016.

2 KIBBLE, T. W. B. Topology of cosmic domains and strings. **Journal of Physics A**, v. 9, n. 8, p. 1387-1398, 1976.

3 CHANDRASEKHAR, S. **The mathematical theory of black holes**. Oxford, UK: Clarendon Press, 2009. 646 p. (Oxford classic texts in physical sciences).

PG167

Determination of mobility edge in presence of metal-to-insulator transition

TITO, M. A.[1]; POUSSEP, I.[1]

anton_2080@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The mobility edge energy is the fundamental critical parameter of a three-dimensional localization theory, which separates the below lying localized states from the above high energy extended states. (1) In this work, determination of mobility edge in presence of metal-to-insulator transition Recombination dynamics of excitons was studied in multiple narrow quantum well GaAs/AlGaAs heterostructures. Disorder generated by interface roughness considerably affects transport of the conduction band electrons and at appropriate quantum well width results in a metal-to insulator transition. Localization of the electrons was found to be responsible for the exciton recombination time measured in the vicinity of the metal-to-insulator transition. Measurement of the exciton recombination time as a function of the energy allowed for determination of the critical energy of the mobility edge attributed to the conduction band electrons. The mobility edge energy obtained in this way demonstrates intersection with the Fermi level energy at the critical disorder corresponding to the metal-to-insulator transition.

Palavras-chave: Metal-to-insulator transition. Interface. Time-resolved photoluminescence.

Referências:

1 MOTT, N. F. The metal-insulator transition in extrinsic semiconductors. **Advances in Physics**, v. 21,n.94, p. 785-823, 1972.

PG168

Boson stars in scalar-tensor gravity

TOMA, C.[1]; HARTMANN, B.[1]

ctoma@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

With the advent of high precision observations of radiation from astrophysical sources it becomes important to understand the difference between different types of ultra-compact objects. The most popular type of ultra-compact objects are black holes, which are predictions of General Relativity, i.e. Einstein's theory of gravitation. However, also other, more exotic possibilities exist, amongst which are so-called boson stars, self-gravitating objects composed out of scalar bosons (see for instance (1)). These possess – in contrast to black holes – no event horizon and should, in principle, be distinguishable from black holes by future detections of gravitational waves (via the LIGO/VIRGO experiment) or electromagnetic radiation (via e.g. the Event Horizon telescope). Due to their very strong gravitational field, these objects are ideal testing grounds for extended gravity models such as scalar-tensor gravity models in which the gravity theory contains a metric tensor field and additionally a scalar field (see (2) for reference). Currently, I am investigating a model in which the scalar field possesses a shift symmetry. Up to now, only compact objects with horizons have been constructed in these models, while I am interested in the numerical construction of spherically symmetric boson stars.

Palavras-chave: Boson stars. General relativity. Scalar-tensor gravity.

Referências:

1 KLEIHAUS,B.; KUNZ, J.; LIST, M. Rotating boson stars and Q-balls. **Physical Review D**, v. 72, n. 6, p. 064002-1-064002-17, 2005.

2 SOTIRIOU,T. P.; ZHOU, S.-Y. Black hole hair in generalized scalar-tensor gravity: an explicit example. **Physical Review D**, v. 90, n. 12, p.124063-1-124063-17, 2014.

PG169

Development of Hot Start Taq DNA polymerase alternatives for biotechnological applications

TORRES, N. U.[1, 2]; COSTA, F. C.[1, 2]; MUNIZ, A. B.[1,2]; MALUF, F. V.[1,2]; GUIDO, R. V. C.[1]

naiara.utimura@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Cellco Biotec do Brasil LTDA

Polymerase Chain Reaction (PCR) is a widely used technique in molecular biology laboratories, forensic analysis and clinical diagnosis. (1) PCR is based on thermostable DNA polymerase activity which extends a nucleotide oligo bound to a DNA template resulting on DNA synthesis. (1) Taq DNA polymerase from *Thermus aquaticus* is the most used enzyme to synthesize DNA. The main drawback of this DNA polymerase is its residual activity at low temperatures (between 25 and 45 °C, when PCRs are usually set up) which can lead to non-specific amplifications primer dimer formation. (2) Therefore, Taq DNA polymerase is inappropriate to some applications as forensic analysis and clinical diagnosis. To overcome this problem companies have developed a Hot Start Taq DNA polymerase: an enzyme with reduced activity at low temperatures. There are many methodologies to produce a Hot Start polymerase as binding the polymerase to antibodies or aptamers. (3) In this case, an initial heating releases the antibodies/aptamers from the enzyme which recovers it activity after this hot start step. (3) To develop the Hot Start Taq DNA polymerase technology in Brazil, this work intends to produce a high quality Hot Start enzyme combining mutagenesis and antibodies/aptamers-bound technique. In order to heterologously produce a Taq DNA polymerase we cloned its coding DNA sequence (CDS) on the expression vectors pET-6xHis, pET-6xHis-TRX and pET-6xHis-NUS. Those cloning systems have features that facilitate chromatographic purifications and allow to explore solubility of different protein tags. We analyzed Taq expression varying several conditions as *Escherichia coli* strains, growth media and expression temperatures. The expression levels analyzed by SDS-PAGE indicates higher protein expression using the strain Rosetta 2 transformed with pET-6xHis-Taq plasmid in the ZYM-5052 autoinducing media with a 16 hours expression at 25 °C. Taq DNA polymerase was purified by ion mobilized affinity chromatography and resulted in purity higher than 90%. Our purified enzyme failed in amplifying a 1 kbp fragment from 1 ng of lambda DNA in a PCR indicating an inactive enzyme or nuclease presence. To test nuclease presence, the enzyme was incubated with DNA and reaction buffer at 37 °C and the mixture was analyzed by agarose gel electrophoresis. The incubated DNA with the polymerase was completely degraded showing a nuclease contamination in our Taq DNA polymerase. Our next steps to separate nucleases from Taq DNA polymerase will be based on chromatographic methods as other affinity chromatographies and gel filtration. Concomitantly, mutagenesis of Taq CDS were performed to generate cold-sensitive DNA polymerases. Production of this new Hot Start Taq DNA polymerase in Brazil will help to decrease the importation dependence and diagnostic costs.

Palavras-chave: Hot Start DNA polymerase. DNA. PCR.

Referências:

1 ISHINO, S.; ISHINO, Y. DNA polymerases as useful reagents for biotechnology - the history of developmental research in the field. **Frontiers in Microbiology,** v. 5, p. 465, 2014.PMC4148896.

2 CHIEN, A.; EDGAR, D. B.; TRELA, J. M. Deoxyribonucleic acid polymerase from the extreme thermophile Thermus aquaticus. **Journal of Bacteriology,** v. 127, n. 3, p. 1550-7, 1976.

3 LEBEDEV, A. V. et al. Hot start PCR with heat-activatable primers: a novel approach for improved PCR performance. **Nucleic Acids Research,** v. 36, n. 20, p. e131, 008.

PG170

Caracterização de pulsos ultracurtos de femtossegundos

TUJERA, G. A.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]

guilhermea.tujera@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP ;

Pulsos de femtossegundos apresentam características que os tornam interessantes para diversos estudos em óptica não linear; devido a sua curta duração temporal eles apresentam larga banda espectral e altas intensidades de pico. Dada a largura espectral dos pulsos de femtossegundos, efeitos de dispersão passam a ser determinantes no alargamento temporal dos pulsos a medidas em que estes se propagam e atravessam elementos ópticos. (1) Tal efeito pode levar, por exemplo, a uma diminuição considerável da intensidade, alterando a resposta não linear que se deseja observar. Sendo assim, a caraterização temporal e espectral de pulsos de femtossegundos é de extrema relevância. Para a caracterização completa do pulso, utilizamos a técnica FROG (*Frequency Resolved Optical Gate*). (2) Nesta técnica utilizarmos o próprio pulso, numa espécie de correlação interferométrica, sendo possível obter algumas características do pulso através de uma interação não-linear deste e sua réplica gerada. A técnica FROG consiste em resolver espectralmente a intensidade não linear em função do atraso entre o pulso e sua réplica. Para realizarmos a técnica FROG, utilizamos a geração de segundo harmônico (SHG) com fenômeno não linear que mede a interação entre os pulsos utilizados. O FROG utiliza o mesmo princípio da autocorrelação, ou seja, o pulso original é replicado, suas réplicas sofrem atrasos uma em relação a outra através da movimentação de um dos braços do autocorrelator. Os dois pulsos são focalizados por uma lente em um cristal gerador de segundo harmônico, o qual é coletado em um espectrômetro. A partir de um grá[U+FB01]co da intensidade do sinal de SHG em função do atraso e comprimento de onda, pode-se, usando-se um algoritmo de reobtenção de fase, determinar tanto a fase quanto a amplitude do campo elétrico empregado no experimento. (2) A vantagem da técnica FROG sobre outras técnicas é sua capacidade da caracterização completa do pulso (2), ou seja, ela permite recuperar informações sobre a intensidade temporal, espectral e fase do pulso a ser analisado. Para a caracterização do pulso laser foram utilizados dois aparatos experimentais, o primeiro foi o sistema implementado em laboratório e o outro aparato experimental foi o FROG vendido comercialmente (Grenouille). Estes dois aparatos experimentais foram utilizados para que fossem entendidas suas limitações e vantagens. Para se caracterizar foi utilizado um laser de Ti:Safira (800 nm, 5MHz). Experimentalmente o pulso laser a ser analisado foi exposto a duas situações distintas; uma em que era obtido sua menor duração temporal e em outra que introduzimos um *chirp,* aumentando a duração temporal do pulso laser.

Palavras-chave: FROG. Pulsos de femtossegundos

Referências:

1 SHEEHY, M.A. et al. Role of the background gas in the morphology and optical properties of laser-microstructured silicon. **Chemistry of Materials, v.** 17, n.14, p.3582-86, 2005.

2 TREBINO, R.; KANE, D. J. Using phase retrieval to measure the intensity and phase of ultrashort pulses: frequency resolved optical gating.**Journal of the Optical Society of America A, v.**10,n. 5,p.1101-11, 1993.

PG171

Computação quântica adiabática usando qubits supercondutores

VARGAS-GRAJALES, J. A.[1]; BRITO, F. B. de[1]

juanvagra@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A computação quântica adiabática (CQA) tem sua pedra angular no teorema adiabático (1), cuja eficiência está relacionada tradicionalmente à proporção da variação temporal do Hamiltoniano que descreve o sistema e o gap mínimo entre o estado fundamental e o primeiro excitado. Normalmente, esse gap tende a diminuir quando aumenta os recursos (bit quântico: qubit) de um processador quântico, exigindo variações lentas do Hamiltoniano, para garantir uma dinâmica adiabática. Entre os candidatos para a sua implementação física, estão os qubits baseados em circuitos supercondutores os quais têm um grande potencial, por causa de seu alto controle e escalabilidade promissora. (2) No entanto, quando esses qubits são implementados, eles têm uma fonte intrínseca de ruído devido a erros de fabricação, que não podem ser desprezados. (3) Por isso, nós estudamos a fidelidade da computação como uma função do desvio padrão dos parâmetros físicos do qubit, realizando a simulação da dinâmica de sistemas pequenos. Além disso, também é analisado se as condições de adiabaticidade podem ser tomadas como medidas quantitativas gerais. E finalmente, é proposto um limite inferior para a fidelidade de computação de um sistema de dois níveis.

Palavras-chave: Computação quântica adiabática. Qubits supercondutores.

Referências:

1 FARHI, E.et al. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complet problem.**Science**, v. 292, n.5516, p.472.475, 2001.

2 CLARK, J.; WILHELM, F. K. Superconductting quantum bitas. **Nature,** v.453, p.1031-1042,2008.doi:10.1038/nature07128.

3 ZHU, Z. et al. Best-case performance of quantum annelers on native spin glassbenchmarks. **Physical Review A**, v. 93, n.1, p.012317,2016.

PG172

Formulações de Quarks para a QCD na Rede

VISCARDI, L. A. M.[1]; MENDES, T. C. R.[1]

leandro.viscardi@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente projeto propõe o estudo da Cromodinâmica Quântica (QCD) através de simulações numéricas da teoria na rede. (1-2) Mais precisamente, será considerado o caso da QCD completa - levando-se em conta efeitos devidos a quarks dinâmicos - para dois sabores (degenerados) de quarks, correspondentes às duas espécies de quarks leves presentes na teoria. Serão analisadas as formulações de férmions de Wilson e férmions staggered para a discretização dos campos de quarks na rede, comparando-se entre elas a eficiência de simulação e os efeitos de discretização.

Palavras-chave: QCD. Rede. Férmions.

Referências:

1 ROTHE, H. J. **Lattice gauge theories**: an introduction. 4th ed. Hackensack, N.J.: World Scientific, 2012. (World scientific lecture notes in physics, v. 82).

2 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice**: an introductory presentation. Berlin: Springer, 2010 (Lecture notes in physics, v. 788).

PG173

Cálculo teórico da densidade eletrônica de sistemas periódicos tridimensionais

WANDERLEY, A. B.[1], ELLENA, J. A.[1]

adilson.wanderley@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Ingredientes farmacêuticos ativos em estado sólido podem ter suas propriedades farmacêuticas melhoradas por modificações em sua estrutura cristalina. (1) O conhecimento destas estruturas permite a melhora das características farmacêuticas, tais como a estabilidade térmica, a solubilidade e a velocidade de dissolução através do desenho de novas formas sólidas utilizando técnicas de engenharia de cristais moleculares. Desta forma, é possível conceber e manipular as interações intermoleculares complementares que dão lugar à formação dos cristais levando em conta as características dos grupos funcionais doadores e aceitadores de ligações de hidrogênio. O desenho, síntese supramolecular, avaliação e caracterização de novas formas sólidas de insumos farmacêuticos ativos é um trabalho multidisciplinar que envolve métodos tanto experimentais como teóricos. O estudo teórico da Densidade de Carga tem o intuito de correlacionar a reatividade das drogas e seu desempenho farmacêutico com as características topológicas da densidade de carga molecular, dado que as interações medicamentos-receptores estão governadas pelas propriedades eletrônicas moleculares. Assim, estudos teóricos em condições periódicas tridimensionais permitem complementar e acompanhar as propriedades eletrônicas. Estes estudos envolvem o cálculo da densidade de carga, cálculo dos fatores de estrutura e a teoria de átomos em moléculas (AIM). (2) O objetivo deste trabalho é caracterizar a topologia da densidade de carga e correlacionar suas propriedades eletrônicas com suas propriedades físico-químicas. Os cálculos teóricos para sistemas periódicos tridimensionais serão realizados por meio do pacote de programas CRYSTAL14 (3) utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) no nível de teoria B3LYP/6-31G.

Palavras-chave: Sistemas periódicos tridimensionais. Formas sólidas de fármacos. Átomos em moléculas. Densidade de carga eletrônica. Teoria do funcional da densidade.

Referências:

1 GNANASEKARAN, R. et al. Understanding the N–N bond cleavage and the electrostatic properties of isoniazid drug molecule via theoretical charge density study. **Computational and Theoretical Chemistry** , v.966, n.3, p.259–264,2011.

2 BADER, R. F. W. - **Atoms in molecules - a quantum theory**. Oxford: Oxford University Press,1990.

3 DOVESI, R. et al. - CRYSTAL14: a program for the Ab initio Investigation of crystalline solids. **International Journal Quantum Chemistry,** v.114, p.128-1317, 2014.doi:10.1002/qua.24658.

PG174

Symmetries and boundary conditions in many-body systems

ZAWADZKI, K.[1]; D'AMICO, I.[2]; OLIVEIRA, L. N. de[1]

krissia.zawadzki@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Department of Physics - University of York

The increasing interest in systems for quantum technologies has motivated the study of finite-size problems. In particular, one of the most exciting challenges to be faced is to understand mechanisms allowing to reproduce the quantum thermodynamical limit from a finite system. (1) By constraing the size of the problem, effects of boundary conditions become important and play a crucial role in symmetries. The present work addresses the connections between boundary conditions and symmetries in the context of the Hubbard model, whose Hamiltonian displays a variety of symmetries. (2) We investigate finite lattices under open, periodic and twisted boundary conditions, with special focus to the latter. (3) We devise numerical solutions for the case in which the Coulomb repulsion U is finite, but also revisit the analytical solutions of the non-interacting ($U = 0$) and fully-repulsive ($U \to \infty$) Hubbard Hamiltonians. Our main finding is that if the twisted boundary condition is chosen so that $\theta = \pi L/2$, where L is the system size, we are able to mimic the symmetries of the infinite Hubbard model. (2) For instance, for lattices small as $L = 7$ we show that the ground-state and gap energies are very close to the $L \to \infty$ limit. Based on our results, we discuss potential applications of twisted boundary conditions to quantum experimental setups which are currently being studied for quantum simulations, e.g., Bose-Einstein condensates or ultracold fermionic atoms.

Palavras-chave: Boundary conditions. Symmetries. Hubbard Hamiltonian.

Referências:

1 GAMMEL, J. T.; CAMPBELL, D. K.; LOH JUNIOR, E. Y. Extracting infinite system properties from finite size clusters: "phase randomization/boundary condition averaging". **Synthetic Metals**, v. 57, n. 2-3, p. 4437-4442, 1993.

2 LIEB, E. H., WU, F. Y. The one-dimensional Hubbard model: a reminiscence. **Physica A**: statistical mechanics and its applications, v. 321, n. 1-2, p. 1-27, 2003.

3 SHASTRY, B. S.; SUTHERLAND, B. Twisted boundary conditions and effective mass in Heisenberg-Ising and Hubbard rings. **Physical Review Letters**, v. 65, n. 2, p. 243-246, 1990.

Índice de Autores

A
ACOSTA, V. 299
AGUIAR, A. C. C. A. 104, 113, 349
AKAMATSU, D. Y. 31
AKCELRUD, L. 184
ALMEIDA FILHO, H. A. de. 118
ALMEIDA, G. F. B. 116
ALMEIDA, J. M. P. de 39, 46, 116, 299
ALMEIDA, L. R. de 204, 351
ALMEIDA, N. S. de 32, 83, 140
ALMEIDA, S. M. 104
AMARANTE, A. M. 120
AMORIM, D. R. B. 122
ANDRADE, E. de C. e 61, 130
ANDRADE, M. B. de 53, 183, 246, 306, 318
ANDRADE, R. de A. P. 160
ANDRICOPULO, A. D. 64, 93, 250, 301, 347
AOKI, P. H. B. 226
APRILE, N. P. 123
ARAKAKI, H. 356
ARAÚJO, A. P. U. de 87, 158, 262, 274
ARAÚJO, E. A. de 128
ARAÚJO, R. do N. 130
ARAUJO, A. T. de 58
ARAUJO, F. L. de 126
ARAUJO, G. D. 124
ARAUJO, H. S. 357
ARBELETCHE, L. 131
ARGENTIN, M. N. 133
ARTHUZO, G. 135
ASSIS, P. 255
ATENCIO, D. 246
AURICHIO, V. H. 137
AZEVEDO, É. C. de 138

B
BACHELARD, R. P. M. 68, 191
BADAN, L. da C. 140
BAGNATO, G. de G. 142
BAGNATO, V. S. 48, 52, 65, 86, 92, 135, 193, 209, 215, 223, 228, 236, 265, 270, 293, 340
BALOGH, D. T. 67, 318
BARBANO, E. C. 212, 346
BARRETO, D. L. 143

BARROS, A. 215
BARROS, I. de A. 33
BASSO, L. G. M. 327
BASTOS, C. M. de O. 144, 150
BATISTA, R. da F. M. 145
BELLINI, N. K. 147
BELTRAMINI, L. M. 59
BENATTI, A. 149
BERNARDI, J. C. 85, 260
BESSE, R. 144, 150
BEVILAQUA, J. L. B. 215
BIRAL, E. J. P. 153
BLANCO, K. C. 52, 100, 293
BOITO, D. R. 37, 289
BONAGAMBA, T. J. 164, 296, 354
BORALLI, C. M. S. 154
BOSSOLAN, N. R. S. 133, 180
BOTELHO JUNIOR, M. V. 37
BRIGANTI, L. E. R. P. P. L. D. B. 156
BRITO, F. B. de 33, 102, 242, 252, 256, 366
BROGNARA, G. 158
BRUNELLI, R. 160
BRUNO, O. M. 118, 249, 325
BUENO, R. V. 290
BUKZEM, A. de L. 297
BUZZÁ, H. H. 48, 135

C
CAETANO, J. 307
CAFACE, R. A. 74, 161
CALVELLO, V. S. 35
CAMAPANA FILHO, S. P. 297
CAMARGO, A. S. S. de 115, 194
CAMARGO, I. L. B. C. 58, 109, 216
CAMPOS, C. de P. 163
CANCINO-BERNARDI, J. 244, 310
CÂNDIDO, D. R. 174
CARACANHAS, M. A. 223
CARDOSO, C. 101, 164
CARVALHO JUNIOR, P. de S. 189
CARVALHO, A. L. 49
CARVALHO, L. F. 166
CASARIN, R. L. 78
CASSAGO, A. 202, 262
CASTILHO, P. C. M. 65, 265
CASTRO NETO, J. C. de 36, 60, 73, 78, 86, 106, 110, 215, 258
CATURELLO, N. A. M. S. 150

CAVALHEIRO, E. T. G. 62
CAVALLINI, D. 36
CAVASSIN, P. 167
CAVINI, Í. A. 168
CERINI, M. F. 170
CERVINI, P. 62
CESARINO, V. 172
CEZAR, J. C. 278
CLEMENTINO, L. O. D. 38
COCCA, L. H. Z. 175, 213
COELHO, F. B. 305
COLUCCI, R. 177
COMIN, C. H. 42
CONCEIÇÃO, R. 255
CONSOLE, F. 178
CORRADINE, G. 39
CORREA, A. G. 104
CORREIA, A. R. 179
CORREIA, C. R. D. 113
COS, P. A. 215
COSTA, F. C. 362
COSTA, G. C. 180
COSTA, G. G. da 59
COSTA, J. V. I. 174
COSTA, L. da F. 42, 201, 211
COSTA, R. G. L. 40
COSTA, Y. A. da 182
COURTEILLE, P. W. 47
COURTENAY, J. C. 297
CRUZ, A. R. 153
CRUZ, C. G. C. 183
CUBGA, G. 184
CUCCHIERI, A. 137, 166
CUSTODIO, J. M. F. 213

D

D'ALMEIDA, C. de P. 186
D'AMICO, I. 369
DA SILVA, M. T. A. 154
DAGHOFER, M. 285
DANCIÃES, I. 188
DE BITTENCOURT, H. P. 152
DE BONI, L. 107, 112, 175, 213, 253
DE GROOTE, M. C. R. 216
DE SOUZA, V. 255
DEAZEVEDO, E. R. 40, 45, 184, 242
DEFFUNE, E. 270

DEOLIVEIRA, M. L. B. 137
DIAS, R. 175
DINIZ, L. F. 189, 351
DOBRIGKEIT, C. 255
DOMINGUES, G. S. 42
DONATO, M. H. F. 43
DONOSO, J. P. 188
DRESSLER, B. 44
DUQUE, H. V. 65

E
EGUES, J. C. 153, 174
ELLENA, J. A. 53, 55, 189, 246, 368
ESPIRITO SANTO, T. S. do 191
EVANGELISTA, D. E. 192

F
FALVO, M. 305
FARIA, C. M. G. de 193
FARIA, G. C. 167, 177
FARIA, R. C. 71
FARIA, R. M. 67, 122, 126
FARIA, W. 194
FARIAS, K. 265
FENERICK, R. 45
FERNANDES, A. 196
FERNANDES, A. A. C. 79
FERNANDES, A. de F. 327
FERREIRA, A. G. A. 296
FERREIRA, F. 197
FERREIRA, L. A. 245
FERREIRA, M. 255
FERREIRA, P. R. 46
FERREIRA, S. J. V. 201
FERREIRA, T. A. 199
FILGUEIRAS, J. 40, 242
FLORES, G. A. 182
FLOREZ ARIZA, A. J. 202
FOERSTER, B. U. 164
FONSECA, A. L. M. da 147
FONSECA, M. B. da 250
FONSECA, R. D. 213
FONTANARI, J. F. 208
FORTULAN, C. A. 164
FORTUNATO, T. C. 205
FRANCA, E. de F. 120
FRANCISCO, L. H. 206
FRANCO, C. 208

FRANKLIN, L. C. 47
FREGNANI, J. H. T. G. 49
FREITAS, L. C. F. de 48
FREITAS, L. C. G. 120
FRITSCH, A. 209
FURUTA, R. H. M. 49

G
GALANTE, D. 170, 199
GALDIANO, M. D. B. 50
GARBUIO, M. 52
GARCÍA, A. 209
GARCIA, C. R. 349
GARCIA, G. S. 53
GARRATT, R. C. 168, 238, 262
GERALDE, M. C. 228
GETELINA, J. C. 210
GEWERS, F. L. 211
GODOY, A. 281
GODOY, A. S. 294
GOMES, J. A. C. 212
GOMES JUNIOR, F. G. 254
GONÇALVES, D. 49, 62, 90, 224
GONÇALVES, L. 55
GONÇALVES, P. J. 253
GONÇALVES, R. V. 89
GOTARDO, F. 175, 213
GOVONE, A. B. 215
GRAEBIN, C. S. 250
GUEDES-SOBRINHO, D. 150
GUERRA GIRALDEZ, D. 202
GUESSI, L. H. 218
GUIDO, R. V. C. 79, 104, 113, 229, 290, 294, 349, 362
GUIMARÃES, F. E. G. 74, 161, 258, 270, 297, 303, 312
GUTIERREZ, E. D. M. 65

H
HARTMANN, B. 123, 178, 359, 361
HENN, E. A. de L. 88
HENRIQUE, F. R. 220
HERNANDES, A. C. 206
HIGASI, P. 221
HIROTA, L. da C. B. 32
HORJALES, E. 216
HOYOS, J. A. 210
HUAMANI CHAVIGURI, J. R. 223

I
IBÁÑEZ-REDÍN, G. G. 49, 224
IERICH, J. C. M. 120
IGLESIAS, B. A. 175
INADA, N. M. 52, 163, 193, 228, 236, 329
ISRAEL, I. 225

J
JO, J. 314
JOCHELAVICIUS, K. 226
JOHNS, M. A. 297

K
KADOWAKI, M. A. S. 192, 221, 281
KALBITZER, H. R. 168
KARASAWA, E. G. 56
KASSAB, G. 228
KATEKAWA, E. 229
KLEIN, A. K. 58
KRÜGER, A. L. 230
KUBOTA, T. M. K. 232
KUNITAKE, P. Y. 59
KURACHI, C. 103, 163, 193, 215, 312, 314

L
LACHINI, N. 234
LANG, R. G. 235
LEITE, F. de L. 120
LEITE, I. S. 236
LEONARDO, D. A. 238
LIMA, A. L. de 240
LIMA FILHO, J. B. de 243
LIMA, G. M. A. 290, 294
LIMA, J. F. R. 79
LIMA, M. P. 150
LIMA, R. B. B. 242
LINS, P. 244
LIVRAMENTO, L. R. 245
LOPES, G. A. de C. 246
LOPES, L. 255
LORDELLO, V. D. 248
LUCCAS, G. A. A. 60
LUZ, R. 255
LYLES, Z. 236

M
M'PEKO, J. C. 89
MACHICAO, J. 249

MAGALHÃES, A. B. 232
MAGALHÃES, K. M. F. 65
MAGALHÃES, L. G. 64, 93, 250, 301
MAGNO, G. F. 61
MAGON, C. J. 188
MAIA, L. P. 124, 225, 271
MALAVAZI, A. H. A. 252
MALUF, F. V. 290, 294, 349, 362
MANOEL, D. da S. 253
MANZANI, D. 188
MANZINE, L. R. 128
MARASSI, A. G. 254
MARCASSA, L. G. 72, 302
MAREGA JÚNIOR, E. 31, 38, 266
MARION, S. C. F. 62
MARTINS, C. T. 64, 93
MARTINS, G. F. 256
MARTINS, L. M. 63
MARTINS, M. 305
MARTINS, M. J. 336, 345
MARTINS, R. J. 116
MARTINS, V. B. 255
MASCARENHAS, S. 160
MASCARENHAS, Y. P. 329
MATERÓN, E. M. 71
MATIAS, P. 336
MATOS, L. de 36, 73, 106
MATTOS, V. S. 36, 258
MAZO, P. L. 65
MEDONCA, C. R. 116
MELENDEZ, M. E. 49
MELHADO, M. S. 66
MELO, C. C. 260
MELO, C. C. de 189
MELLO, B. L. 192
MENDES, T. C. R. 166, 234, 367
MENDONÇA, C. R. 46, 220, 253, 299, 318, 364
MENDONÇA, D. C. 262, 274
MENEGHELLO, R. 263
MENEZES, L. P. 264
MERCADO, E. G. 265
MESQUITA, A. 95
MESQUITA, G. M. 213
MEYER, M. 307
MIGUEZ, M. L. 268
MILORI, D. M. B. P. 230, 232, 307
MION, W. M. 270

MIRANDA, G. da S. 67
MIRANDA, M. M. P. 266
MIRANDA, P. B. 243
MISOGUTI, L. 66, 212, 268, 346
MOLINARI, J. 184
MONTALVÃO, R. W. 333
MONTEIRO, V. M. 271
MONTENEGRO, V. 357
MONTESSO, M. 188
MONTRAZI, E. T. 101
MORAES, A. de S. 120
MORAES NETO, G. D. de 357
MORAES, R. R. D. de 272
MORAES, T. B. 45
MORAIS, S. T. do B. 262, 274
MORAZOTTI, N. A. da C. 276
MOREIRA, N. A. 68
MORGADO, F. F. 278
MORI, T. J. A. 278
MORIYAMA, L. T. 103, 186, 205
MOULS, C. L. 278
MOUSSA, M. H. Y. 286, 315, 341, 357
MULINARI, E. J. 279
MUNIZ, A. B. 362
MUNIZ, J. R. C. 196, 204, 279
MUNIZ, S. R. 32, 35, 43, 83, 97, 98, 140, 299
MUNTE, C. E. 168
MURANO, A. 184
MURANO, M. 184

N

NAKADA, P. J. T. 70
NAKAMURA, A. M. 281
NALIN, M. 188
NAPOLITANO, H. B. 213
NAPOLITANO, R. de J. 276
NARDI, L. M. C. 283
NASCIMENTO, A. F. 238
NASCIMENTO, A. S. 138, 281, 287, 344
NASCIMENTO, G. F. do 36, 71
NATORI, W. M. H. 285
NAVARRO, J. C. A. 65
NAVARRO, M. V. de A. S. 263, 331
NAZARIO, N. R. 83, 140
NEVES, N. I. de S. 73, 106
NEVES, R. F. de O. 72
NICOLODELLI, G. 230

NIRO, C. M. 74
NOBRE, D. A. 76
NOBRE, T. M. 226
NOGUEIRA, V. H. R. 287

O
OLIANI, F. H. 289
OLIVA, G. 113, 290, 294, 333, 349
OLIVEIRA, A. A. 290
OLIVEIRA, B. P. de 293
OLIVEIRA, D. D. de 79
OLIVEIRA, E. L. 164, 296
OLIVEIRA, G. D. C. 213
OLIVEIRA, I. M. 292
OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de 49, 62, 71, 120, 224, 226, 343
OLIVEIRA, K. I. Z. de 294
OLIVEIRA, L. N. de 218, 369
OLIVEIRA, L. O. de 78
OLIVEIRA, M. T. 347
OLIVEIRA NETO, F. de 286, 357
OLIVEIRA NETO, M. de 327
ONCEBAY, C. 299
ONO, B. A. 297
OTA, I. N. N. 300
OTUKA, A. J. G. 318

P
PAIVA, F. F. 32, 50, 82, 83, 101, 108, 140, 164, 182, 264, 292, 334
PALOMINO-SALCEDO, D. L. 301
PANCIERA, M. 113
PAOLILLO, F. R. 36, 60, 78, 86, 258
PASSAGEM, H. F. 302
PENTEADO, P. H. 153
PEREIRA, D. M. B. 323
PEREIRA, H. 196
PEREIRA, M. L. 80
PEREIRA, R. D. 81
PEREIRA, R. G. 285
PEREZA, C. N. 213
PESSOA, V. H. de M. 82
PIIADOV, V. 128
PIMENTA, M. 255
PINCERATO, K. 215
PINTO JUNIOR, F. F. 303
PINTO, R. D. 172
PIZETTA, D. C. 82, 96, 305
POLIKARPOV, I. 128, 156, 192, 221, 281
PORTUGAL, R. V. 202, 262

POUSSEP, I. 360
PRADE, R. A. 279
PRATAVIEIRA, S. 92, 186, 312
PUSEP, Y. A. 356

Q
QUEIROZ, A. A. A. E. de 53, 306
QUIBAO, M. P. 83, 140

R
RAM, S. 297
RAMOS, M. L. 215
RANULFI, A. C. 307
RAYMUNDO-PEREIRA, P. A. 343
REPOILA, I. 216
REYES, G. M. 85
RIBEIRO, C. C. H. 309
RIBEIRO, O. R. 86
RIBOVSKI, L. 310
RODRIGUES, E. L. L. 182
RODRIGUES, F. 170
RODRIGUES, F. A. 338
RODRIGUES, J. E. F. S. 206
RODRIGUES JUNIOR, J. J. 116
ROMANO, R. A. 92, 103, 312
ROMUALDO, L. L. 213
RONQUI, J. R. F. 142, 313
ROSA, H. V. D. 87
ROSA, R. G. T. 215, 314
ROSSETTI, R. F. 315, 357
RUGGIERO, C. A. 197, 336
RUSSOWSKY, D. 64, 93

S
SÁ, A. A. de C. 354
SABINO, F. P. 144
SALAS, O. I. A. 318
SAMPAIO, R. P. 319
SANCHES, E. A. 329
SANTANA, F. T. 317
SANTOS, A. L. 329
SANTOS, B. N. 88
SANTOS, D. M. 297
SANTOS, E. F. S. 113
SANTOS, E. R. dos 321
SANTOS, F. E. 317
SANTOS, G. C. 58, 109
SANTOS, L. F. L. S. 89

SANTOS, M. H. 90
SANTOS, N. F. 92
SANTOS, T. 320
SBRISSA NETO, D. A. 323
SCABINI, L. F. S. 325
SCHIO, P. 278
SCHNEIDER, J. F. 76
SCORTECCI, J. F. 196, 327
SCOTT, J. L. 297
SEGATO, F. 279
SEGURA, C. O. O. 35, 97, 98
SENESI, G. S. 307
SERIDONIO, A. C. 218
SERRÃO, V. H. B. 196, 327
SERROR, P. 216
SHIMIZU, F. M. 71
SILVA, A. C. 83, 140
SILVA, C. C. 145, 283
SILVA, C. C. P. da 351
SILVA, D. M. D. D. da 334
SILVA, E. E. D. 331
SILVA, E. M. G. 64, 93
SILVA, F. N. 42
SILVA, G. M. R. da 95
SILVA, G. R. da 329
SILVA, J. L. F. da 144, 150
SILVA JUNIOR, J. T. da 336
SILVA, L. de C. R. da 96, 305
SILVA, M. T. A. da 80, 240
SILVA NETO, A. M. da 333
SILVA, P. C. V. da 338
SILVA, P. F. 35, 97
SILVA, R. A. de S. 98
SILVA, R. M. A. A. 83, 140
SILVA, T. P. da 321
SILVA, W. J. G. da 204
SIPAHI, G. M. 81, 144, 150
SIQUEIRA, J. P. 116
SMAIRA, A. de F. 340
SOARES, J. M. 100
SOARES, P. M. S. B. 341
SOARES-PINTO, D. de O. 143, 242
SOLCIA, G. 101
SOUSA, E. P. M. de 72
SOUSA, G. de 102
SOUSA, L. M. de C. 67
SOUSA, M. A. M. 343

SOUSA, S. C. 344
SOUZA, A. S. de 347
SOUZA, C. A. 356
SOUZA, D. G. B. 120
SOUZA, G. de 103
SOUZA, G. E. 349
SOUZA, J. O. de 104
SOUZA, J. P. 44
SOUZA, L. M. de 52
SOUZA, L. R. F. de 349
SOUZA, L. V. de 149
SOUZA, M. A. A. de 258
SOUZA, M. da S. 351
SOUZA, P. V. B. D. de 305, 345
SOUZA, R. F. S. de 73, 106
SOUZA, T. G. B. de 346
SOUZA, V. de 56, 131, 235
SOUZA, W. F. de 107
STELMASTCHUK, L. B. F. 353

T
TANNÚS, A. 152, 254, 305, 345
TAVARES, B. 356
TEIZEN, V. F. 357
TELLES, G. D. 209, 340
TEODORO, M. do C. 359
THIEMANN, O. H. 80, 147, 154, 240, 319, 320, 327, 353
TITO, M. 356
TITO, M. A. 360
TOMA, C. 361
TOMAZINI JÚNIOR, A. 70
TOMAZIO, N. B. 318
TONIN, Y. R. 108
TORRES, B. B. M. 67
TORRES, N. U. 294, 362
TRAVIESO, G. 142, 197, 313
TREVIZAN, W. 296
TUJERA, G. A. 364
TUK, A. P. 317

U
URIU, M. B. 128
USON, I. 238

V
VALADARES, N. F. 238
VANZELLA, D. A. T. 300, 309
VARGAS-GRAJALES, J. A. 366

VECCHI, M. 63, 248
VENTURINE, F. P. 52
VERNEK, E. 153, 357
VIDOTO, E. L. G. 152, 305, 345
VIEIRA, N. C. S. 179
VILLAS-BOAS, P. R. 232, 272
VISCARDI, L. A. M. 367
VIVERO-ESCOTO, J. L. 236
VIZIOLI, H. T. 110
VIZOTTO, M. E. 109

W
WANDERLEY, A. B. 368
WATANABE, A. 307
WESTIN, R. G. 112
WETTERICH, C. B. 72
WILLBOLD, D. 168
WILSON, D. M. 49

Y
YASUOKA, F. M. M. 258

Z
ZANINI, C. L. 113
ZAVAN, R. A. 115
ZAWADZKI, K. 369
ZÍLIO, S. C. 212, 346
ZUCOLOTTO, V. 44, 179, 244, 260, 310

PATROCÍNIO

LAC
Artigos para Laboratório

altmann
altmann s.a. importação e comércio

THORLABS

APOIO

IFSC 23 ANOS
Sustentável

USP

IFSC JUNIOR

SBIifsc