LIVRO DE RESUMOS

SIFSC

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

2019

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

IX Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2019

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 9

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato
Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho
Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa
Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião
Beatriz de Camargo Castex Ferreira
Gabriel Henrique Armando Jorge
Giane Corrêa Ferreira
Humberto Ribeiro de Souza
João Hiroyuki de Melo Inagaki
José Augusto dos Santos
Juliana Naomi Yamauti Costa
Maria Júlia de Arruda Mazzotti Marques
Nayla Naomi Kusimoto Takeuti
Nickolas Pietro Donato Cerioni
Paulina Rossi Ferreira
Roberto Hiroshi Matos Furuta

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 Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(9: 05-09 ago.: 2019: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da IX Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Joao H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2019.
297p.
Texto em português.
1.Física. I. Inagaki, Joao H. de Melo, org. II.Titulo.

ISBN:978-65-993449-1-6 CDD 530

Carta de apresentação

Já em sua nona 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, 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 23ª 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 XXVIII 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 9

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Avaliação da disseminação do gene blaKPC carreado em ambiente genético independente de Tn4401 em bactérias gram negativas
SILVA, G. V. ; BORALLI, C. ; CAMARGO, I. L. B. C. 29

IC2 - Liberdade assintótica na seção de choque $e^+e^- \to$ (hádrons)
RODRIGUES, M. V. 30

IC3 - Effects of electron correlation in two-electron atoms in a two-dimensional system
FIGUEIREDO, B. ; GUO-QIANG, H. 31

IC4 - Produção de anticorpos monoclonais do HIV para entrega direcionada de imunoconjugados
CUNHA, G. D. G. ; GUIMARÃES, F. E. G. 32

IC5 - Evaluating potential inhibitors of Aβ aggregation for treatment of Alzheimer's disease
QUATRONI, F. D. ; SAMPAIO, I. ; ZUCOLOTTO, V. 33

IC6 - Turn-on fluorescence study of a highly selective chemosensor for Zn2+
NUNES, M. C. C. ; CARLOS, F. S. ; GALINDO, D. D. M. ; BONI, L. ; ABATE, G. ; NUNES, F. S. 34

IC7 - Efeitos da temperatura no ritmo de um centro gerador de padrões biológico
REIS, R. 35

IC8 - Condensados dipolares numa armadilha tipo bolha: modos coletivos
OLIVEIRA, E. A. B. ; HENN, E. A. L. 37

IC9 - Caracterização do índice de refração não-linear em vidros teluretos
GASPAROTTO, A. ; DIPOLD, J. ; SANTOS, S. ; ALMEIDA, J. ; MENDONÇA, C. R. 38

IC10 - Síntese e caracterização de novas formas sólidas cristalinas de antidepressivos através do planejamento racional
CECILIO, N. G. ; ELLENA, J. A. 39

IC11 - Uma introdução à teoria dos twistors
CASTRO, T. ; MENCATTINI, I. 40

IC12 - Maleabilidade de redes complexas para topologias variadas
FURUTA, R. H. M. 41

IC13 - Avaliação do controle microbiano através de técnicas fotônicas em solução de preservação de órgãos para transplante
BORGES, A. G. C. ; VOLLET FILHO, J. D. 42

IC14 - Construção de amplificadores laser para utilização no aprisionamento de átomos
MARTINEZ, V. J. ; HENN, E. A. L. 44

IC15 - Expressão de proteínas de capsídeo de circovírus suíno (Porcine Circovirus - PCV) 1 e 3.
ROCHA, T. S. ; SALA, F. A. ; THIEMANN, O. H. 45

IC16 - Montagem de uma linha experimental de Espectroscopia de Plasma Induzido por Laser (LIBS) com pulsos de femtossegundos
BONI, L. ; GARCIA, R. 46

IC17 - Alterações bioquímicas de estresse oxidativo no cladócero Daphnia magna por nanopartículas de óxido de cobre e de platina
CHIQUITO, J. G. G. ; ANDRADE, L. S. ; ZUCOLOTTO, V. ; DORNFELD, A. S. M. 47

IC18 - Estudo da combinação de fotobiomodulação e terapia fotodinâmica em células de carcinoma espinocelular oral
COSTA, C. S. ; FARIA, C. M. G. ; BAGNATO, V. S. 48

IC19 - Resposta de tumores 3D a Terapia Fotodinâmica avaliada com microespectroscopia Raman
MARQUES, M. J. A. M. ; CAMPOS, C. P. ; IERMAK, I. ; INADA, N. M. 49

IC20 - Ensaio antiviral utilizando uma linhagem celular contendo o replicon subgenômico do vírus da febre amarela (Yellow Fever virus - YFV) para a descoberta de fármacos
BATISTA, G. ; FERNANDES, R. S. ; GIL, L. H. V. G. ; OLIVA, G. 50

IC21 - Um estudo acerca do ruído térmico em condutores e semicondutores.
MERENDA, J. V. ; CATANANTE, V. A. A. ; BRUNO, O. M. 51

IC22 - Interferômetro de Mach-Zehnder e a Escolha Retardada Quântica
NAVES, C. B. 52

IC23 - Muonic component of extensive air showers
FIUSA, G. ; SOUZA, V. 53

IC24 - Identificação e caracterização de novos agentes moduladores de microtúbulos com propriedades antitumorais
MARTINS, C. T. ; SILVA, E. M. G. ; MAGALHÃES, L. G. ; B.MASS, E. ; RUSSOSWKY, D. ; ANDRICOPULO, A. D. 54

IC25 - Abordagem global de centralidade em redes complexas
MAZZIERO, M. L. ; COMIN, C. H. ; COSTA, L. F. 55

IC26 - Desenvolvimento de nanocápsulas de astaxantina para aplicação como agente antioxidante em nanomedicina
ZUCOLOTTO, V. ; ABREU, F. M. O. ; BERNARDI, J. C. 56

IC27 - Teoria do funcional da densidade aplicada a um ponto quântico acoplado a um fio quântico
FERRARI, A. L. R. F. ; OLIVEIRA, L. N. 57

IC28 - Utilização de ventoinhas em circuitos elétricos: uma proposta de substituição para as lâmpadas incandescentes
DAMACENO, L. C. G. ; CATUNDA, T. ; COSTA, G. G. G. 58

IC29 - Study of curcumin formulations for the treatment of infectious diseases by Photodynamic Therapy
SILVA, K. O. O. ; BLANCO, K. C. ; SOARES, J. 59

IC30 - Determinação de espectros de refração não linear de soluções de corantes pelas medidas de rotação não linear da polarização elíptica
MISOGUTI, L. ; MOYSÉS, R. 60

IC31 - Estudo de um modelo efetivo de spin por meio de simulações de Monte Carlo.
ANDRADE, E. C. ; MARTINS, W. 61

IC32 - Desenvolvimento de sistema de visão computacional para reconhecimento de trincas e rachaduras em processo de controle de malha fechada aplicado à procedimentos de deposição de materiais metálicos a laser
KÜHL, K. ; CASTRO NETO, J. C. ; YASUOKA, F. M. M. 62

IC33 - Modelo simples de cordas cósmicas
GREGORIO, G. ; HARTMANN, B. 63

IC34 - Verifying the Wiedemann-Franz law for conjugated polymers
GODOY, R. S. ; ZANUTO, V. S. ; FARIA, G. C. 64

IC35 - Introdução à Física dos Buracos Negros e a Algumas Soluções da Relatividade Geral
RAIA NETO, M. ; BOTTI, L. C. L. 65

IC36 - Síntese e caracterização de nanotubos de hematita produzidos em aço carbono para fotossíntese artificial.
RABELO, L. ; LUCAS, T. A. ; VITALINO, R. 66

IC37 - Composição de mapas caóticos usando deep-zoom para aprimoramento de PRNG
ALVARENGA, J. P. V. ; BRUNO, O. 67

IC38 - Reconhecimento molecular entre septinas
GRANATO, J. E. ; GARRATT, R. C. 68

IC39 - Qualitative analysis of global dynamics in predator-prey systems
MOURA, R. 69

IC40 - Critical behavior of an ultracold, non-uniform Bose gas: a computational study
MIOTTI, M. ; HEMMERLING, M. ; BAGNATO, V. 70

IC41 - Thermal properties of the Rubidium-87 gas in a harmonic potential around its Bose-Einstein temperature
MACHADO, L. A. ; MIOTTI, M. P. ; HEMMERLING, M. ; TELLES, G. D. ; BAGNATO, V. S. ... 71

IC42 - Aferição de parâmetros oculares a partir do princípio de Scheimpflug
LAISSENER, B. S. ; CASTRO NETO, J. C. ; OLIVEIRA, A. O. 72

IC43 - Implementação de uma criptografia de stream baseada na equação do K-mapa logístico
LARSEN, B. 73

IC44 - Acoplamento de um filtro sintonizável de cristal líquido em um microscópio óptico para obtenção de imagens multiespectrais de lâminas histológicas.
BELOTTI, H. ; PRATAVIEIRA, S. ; GARCIA, M. 74

IC45 - Cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores III-V
SIQUEIRA, A. 75

IC46 - Desenvolvimento de técnica para processamento de imagens de microscópio especular
MORAIS, F. O. ; OLIVEIRA, A. O. ; OLIVEIRA, L. O. ; CASTRO NETO, J. C. 76

IC47 - Terapia fotodinâmica por excitação de dois fótons em células de melanoma
NAKADA, P. J. T. ; PIRES, L. ; ROMANO, R. A. ; KURACHI, C. 77

IC48 - Montagem de um aparato experimental para observação de LASERS randômicos
FERREIRA, P. R. ; ALMEIDA, J. M. P. ; BONI, L. 78

IC49 - Estudo do efeito vascular da terapia fotodinâmica e curcumina no modelo de Membrana Corioalantóica
FERREIRA, G. C. ; BAGNATO, V. S. ; BUZZÁ, H. H. 79

IC50 - Análises computacionais de condensados de Bose-Einstein turbulentos
MARINO, Á. V. M. ; MADEIRA, L. ; TELLES, G. D. ; BAGNATO, V. S. 80

IC51 - Estudo da cristalização isotérmica de um vidro de diopsídio contendo 6,5 mol% de Fe2O3
RICARTE, A. 81

IC52 - Oxímetro ótico digital para tecnologia biofloco em aquicultura
LUCCAS, G. A. A. ; CASTRO NETO, J. C. 82

IC53 - Análise da atividade da acetilcolinesterase cerebral e muscular de Piaractus mesopotamicus expostos a multiestressores ambientais nanoestruturados e poluentes comuns
TAKEUTI, N. ; VENTURINI, F. ; ZUCOLOTTO, V. 84

IC54 - Magnetic island bifurcation due to resonant magnetic perturbations
ASNIS, Y. ; EVANS, T. ; CANAL, G. 85

IC55 - Estudo e análise do uso da radiação ultravioleta como método de descontaminação de alimentos
GARCIA, É. B. ; CORRÊA, T. Q. ; BAGNATO, V. S. 86

IC56 - Implementação e manutenção de código computacional em framework de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores
PAULI, I. G. ; SIPAHI, G. M. 87

IC57 - Cristalização e caracterização de estado sólidos de insumos a base de paroxetina
DETILE, L. ; ELLENA, J. A. 88

IC58 - Efeitos acústico e fotônico sobre o mesentério em ratos diabéticos
ALVAREZ, C. ; CAMPOS, T. I. T. B. ; DUARTE, A. C. G. O. ; PARIZOTTO, N. A. ; BAGNATO, V. S. ; PAOLILLO, F. R. 89

IC59 - Desenvolvimento de software de controle para um microscópio óptico sem lentes
FEITOSA, P. ; D'ALMEIDA, C. P. ; OLIVEIRA, N. P. ; PRATAVIEIRA, S. 90

IC60 - Recuperação de fase em imagens de microscopia óptica holográfica sem lentes
OLIVEIRA, N. P. ; D'ALMEIDA, C. P. ; PRATAVIEIRA, S. 91

IC61 - Estudos estruturais e funcionais de xilanases com potencial aplicação biotecnológica
VICENTE, M. L. F. 92

IC62 - Optical characterization of metabolics fluorophores NADH and FAD in solution
SOUZA, G. ; ROMANO, R. ; KURACHI, C. 93

IC63 - Macrófagos como alvos em potencial no tratamento de leucemia promielocítica aguda via receptores CD44 e nanocarreadores de lignina
ANTONIO, L. ; RIBOVSKI, L. ; ZUCOLOTTO, V. 94

IC64 - Síntese e caracterização de novas formas sólidas de insumos farmacêuticos ativos (IFAs) usados no tratamento da depressão
MIRANDA, B. R. ; ELLENA, J. A. 95

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Misturas de gases ultrafrios diluídos em dimensão mista
CHAVIGURI, J. R. H. ; CARACANHAS, M. 96

PG2 - Estudo da Maleabilidade em Áreas Urbanas
DOMINGUES, G. S. 97

PG3 - Caracterização do acido aminolevulínico nanoestruturado para melhoria da Terapia Fotodinâmica Tópica
SILVA, G. R. ; SANTOS, A. L. ; SOARES, A. C. ; SANTOS, M. C. ; SANTOS, S. C. ; LIMA, V. R. ; INADA, N. M. 98

PG4 - Otimização e elucidação da atividade antibacteriana de peptídeos catiônicos em patógenos multirresistentes
RIGHETTO, G. M. ; LEAL, T. C. ; LOPES, J. L. S. ; SANTOS FILHO, N. A. ; BELTRAMINI, L. M. ; CILLI, E. M. ; CAMARGO, I. L. B. C. 99

PG5 - Charged Boson star in scalar-tensor gravity
TOMA, C. ; HARTMANN, B. ; BRIHAYE, Y. 101

PG6 - Uma visão geral sobre o paradoxo de Frauchiger-Renner
ROSSI, V. ; SOARES-PINTO, D. 102

PG7 - Internalização da photodithazine em parede microbiana de candida albicans visando terapia fotodinâmica
CAFACE, R. ; NIRO, C. ; VICENTE, M. L. ; FRANCISCO, G. 103

PG8 - Caracterização de elementos genéticos móveis envolvidos na transferência do gene blaKPC em bactérias gram-negativas de origem clínica
BORALLI, C. M. S. ; SILVA, G. V. ; CAMARGO, I. L. B. C. 104

PG9 - Preparação de microcubos de NaTaO3 pelo método de sal fundido para a fotossíntese artificial
ALVES, G. A. S. ; GONÇALVES, R. V. 105

PG10 - Studies on extensive air shower observables
ARBELETCHE, L. ; SOUZA, L. V. 106

PG11 - In vitro assessment of photodynamic therapy using nanoparticles carrying PpIX
LEITE, I. S. ; VIVERO-ESCOTO, J. L. ; LYLES, Z. ; REYES, G. M. ; CANCINO-BERNARDI, J. ; INADA, N. M. 107

PG12 - Macroscopic evidence of quantum turbulence in atomic Bose-Einstein condensate from non-classical velocity statistics distribution
OROZCO, A. D. G. ; BAGNATO, V. S. 109

PG13 - Evolução dirigida com linezolida e tedizolida de Staphylococcus aureus resistente à meticilina (MRSA) e o impacto frente à sensibilidade de diversos antimicrobianos e à formação de biofilme
ZENATTI, L. ; SILVA, G. V. ; DABUL, A. N. G. ; CAMARGO, I. L. B. C. 110

PG14 - Planejamento de candidatos antivirais contra o vírus da febre amarela baseados na estrutura do complexo NS2B-NS3 protease
OLIVEIRA, V. G. F. ; GODOY, A. S. ; NOSKE, G. D. ; OLIVA, G. 111

PG15 - Modelo experimental de descontaminação de rins para transplante
MAFUD, L. C. G. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S. ... 112

PG16 - Studies of Bose-Einstein condensates vortices in bubble traps
BIRAL, E. J. P. ; SANTOS, F. E. A. 113

PG17 - Para além de uma linguagem da natureza: a matematização da eletrostática no século XVIII
NARDI, L. M. C. ; SILVA, C. C. 114

PG18 - Panorama energético do movimento de domínios em *Staphylococcus aureus* UDP-N-acetilglicosamina 2-epimerase
AZEVEDO, É. C. ; NASCIMENTO, A. S. 115

PG19 - Estudo comparativo da compressibilidade isotérmica e da capacidade térmica de um gás de bósons, via dois modelos : variáveis globais e aproximação por densidade local
MARTINS, E. B. ; TELLES, G. D. 116

PG20 - Diversidade de opiniões e bolhas sociais no modelo de Sznajd adaptado
BENATTI, A. ; COSTA, L. F. 117

PG21 - Análise evolutiva e estrutural de genes associados ao Diabetes Mellitus tipo 2
MOTA, D. ; DEMARCO, R. 118

PG22 - Modeling interacting diseases with different time scales
VENTURA, P. C. ; RODRIGUES, F. A. 119

PG23 - Reconstrução do diagrama de fases do modelo de Heisenberg-Kitaev em um campo magnético via ondas de spin não lineares
CÔNSOLI, P. ; ANDRADE, E. 120

PG24 - Recombination dynamics of Landau levels in an InGaAs/InP quantum well
TAVARES, B. ; PUSEP, Y. ; LAPIERRE, R. R. 121

PG25 - Organic thin film lasers applied to chemical sensing
OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; OITICICA, P. R. A. 122

PG26 - QCD perturbativa em ordens altas no decaimento $H \to b\bar{b}$
LONDON, C. Y. M. ; BOITO, D. R. 123

PG27 - Estudo da atividade fotocatalítica de nanocubos de SrTiO3 em suspenção para a produção de hidrogênio solar
CENTURION, H. A. ; GONÇALVES, R. V. 124

PG28 - Modelando brainstorming com sistemas quadro-negro
SALHANI, J. A. S. ; FONTANARI, J. F. 125

PG29 - Inativação fotodinâmica da pneumonia bacteriana utilizando nebulização do fotossensibilizador e iluminação extracorpórea
KASSAB, G. ; TOVAR, J. S. D. ; SILVA, S. S. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S. 126

PG30 - On the impact of ionic specie in organic electrochemical transistor
COLUCCI, R. ; FARIA, G. C. 127

PG31 - Avaliação da radiação UV na descontaminação de órgãos para transplante em modelo animal
GÁMEZ, Y. M. ; VOLLET FILHO, J. D. ; MAYUMI, N. I. ; BAGNATO, V. S. ; KURACHI, C. 128

PG32 - Electronic properties of two-dimensional transition metal dichalcogenides based on Fe-, Co-, Ni-, Cu-groups and their van der Waals heterostructures
BESSE, R. ; LIMA, M. P. ; SILVA, J. L. F. 129

PG33 - Investigation of superfluid properties in a quantum degenerate mixture of sodium and potassium: implementation of feshbach resonances
MAZO, P. ; GUTIERREZ, E. M. ; SALCEDO, E. G. I. ; CASTILHO, P. C. M. ; TAVARES, P. E. S. ; OLIVEIRA, G. A. ; AUGUSTO NETO, G. ; SCARPIN, J. A. ; FARIAS, K. M. 131

PG34 - Deposição de materiais metálicos em pó a laser baseado em controle por visão computacional e aprendizagem de máquina
SOUZA, M. A. A. ; CASTRO NETO, J. C. 132

PG35 - Two photon absorption of several amino-styryl purines for application in fluorescent probes and biological imaging
COCCA, L. Z. ; PIGUEL, S. ; BONI, L. 133

PG36 - A high throughput, inexpensive and open-source biorreactor for optimization of recombinant protein expression
STELMATCHUK, L. ; THIEMANN, O. H. 134

PG37 - Descelularização de traqueia suína utilizando equipamento multifuncional
MION, W. ; SOUZA, A. V. G. S. M. ; DEFFUNE, E. D. ; BAGNATO, V. S. ; GUIMARÃES, F. E. G. G. 135

PG38 - Análise do filme lacrimal utilizando topografia de córnea e visão computacional
OLIVEIRA, L. O. ; CASTRO NETO, J. C. ; OLIVEIRA, A. O. 136

PG39 - Geometria da Informação
MAGNO, G. F. ; SOARES-PINTO, D. 137

PG40 - Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos em regime turbulento
SMAIRA, A. F. ; TELLES, G. D. ; BAGNATO, V. S. 138

PG41 - Collective effects in an ultracold dilute cloud of two-level atoms driven by a scalar light
SANTO, T. S. E. ; BACHELARD, R. 139

PG42 - Random laser mode dynamics in flexible polymeric nanofibers via Pearson's correlation mapping
SCIUTI, L. ; MERCANTE, L. ; TOMAZIO, N. ; MENDONÇA, C. ; CORRÊA, D. ; BONI, L. 140

PG43 - Second order optical nonlinearities in chalcones
MANOEL, D. S. ; GONÇALVES, P. J. ; BONI, L. ; MENDONÇA, C. R. 141

PG44 - Low-cost biosensors based on screen-printed carbon electrodes modified with carbon black and polyelectrolytes films for detection of cancer biomarkers
IBÁNEZ-REDÍN, G. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; GONÇALVES, D. 142

PG45 - Análise da influência de elementos de transposição do clado CR1 na arquitetura do genoma do Schistossoma mansoni
CHEROBIN, E. ; DEMARCO, R. 143

PG46 - Excitações magnéticas em magnetos frustrados inomogêneos
ALMEIDA, I. C. ; ANDRADE, E. C. 144

PG47 - Label-free multispectral lifetime fluorescence to distinguish skin lesions
ROMANO, R. ; SALVIO, A. G. ; ROSA, R. ; JO, J. ; KURACHI, C. 145

PG48 - Investigação de relações entre estrutura e atividade de novas entidades químicas com propriedades antitumorais
SOUZA, M. S. ; FERREIRA, L. L. G. ; ANDRICOPULO, A. D. 146

PG49 - Local oscillator module for MRI
BITTENCOURT, H. ; TANNÚS, A. ; VIDOTO, E. L. G. 148

PG50 - Perturbative QCD in hadronic tau decays and Renormalons
OLIANI, F. ; BOITO, D. 149

PG51 - Descoberta de derivados de marinoquinolina como inibidores de Plasmodium falciparum
SOUZA, G. E. ; AGUIAR, A. C. ; GUIDO, R. 150

PG52 - Seleção de bactérias isoladas de um reservatório brasileiro para a produção de biossurfactante
FERREIRA, J. F. ; BOSSOLAN, N. R. S. 151

PG53 - Interaction mechanisms in chemotherapeutic drugs and cell membrane models associated with drug resistance
SANTOS, K. F. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 152

PG54 - Bioestimulação de sementes de soja com luz laser e biotable de comprimento de onda 660 nm
SARRETA, Y. ; CASTRO NETO, J. C. 153

PG55 - Descoberta de candidatos antivirais baseados na estrutura da enzima NS5 RNA polimerase RNA-dependente do vírus da febre amarela
OLIVEIRA, V. G. F. ; NOSKE, G. D. ; GODOY, A. S. ; OLIVA, G. 154

PG56 - Characterization of atmospheric gases nonlinear refractive index and energetic deep UV generation in hollow core fiber
SOUZA, T. G. B. ; MISOGUTI, L. 155

PG57 - Marcação com laser femtosegundo em superfícies metálicas: criação de estruturas nanométricas em prata pura
MATTOS, V. S. ; PAOLILLO, F. R. ; CAVALLINI, D. ; YASUOKA, F. M. M. ; GUIMARÃES, F. E. G. ; SILVA, M. A. P. ; CASTRO NETO, J. C. 156

PG58 - Cargas Aceleradas e Princípio de Equivalência
WESTIN, R. ; VANZELLA, D. 157

PG59 - Dipolar Bose-Einstein condensates in bubble traps
DINIZ, P. ; HENN, E. ; AMANCIO, E. ; LIMA, A. 158

PG60 - Influência das características de conectividade na execução distribuída de tarefas em redes complexas
PASTORE, A. M. 159

PG61 - Estudos estruturais e funcionais em xilose isomerase
BRIGANTI, L. ; POLIKARPOV, I. 160

PG62 - Transport phenomena of a single molecule through a nanopore
ZAGO, L. A. ; GUIMARAES, F. E. G. 161

PG63 - Uma análise crítica do suposto pioneirismo galileano da matematização da natureza
FERREIRA, C. ; CELESTINO, C. 162

PG64 - Using moleculary dynamics to study Langmuir monolayers mimicking pulmonary surfactant
ZAPATA, J. C. B. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 164

PG65 - Desacoplamento dinâmico contínuo generalizado: implementação
NAPOLITANO, R. J. ; HILARIO, A. 165

PG66 - Antifungal activity of a biosurfactant produced by a thermohalophilic bacillus strain
ARGENTIN, M. N. ; BOSSOLAN, N. R. S. 166

PG67 - Theranostic nanomaterials coated with cell membrane for nanomedicine applications
LINS, P. M. P. ; CANCINO-BERNARDI, J. ; ZUCOLOTTO, V. 167

PG68 - Study of interaction between calibrated sea water, oil and carbonatic rocks by nonlinear vibrational spectroscopy
PALMA, N. B. ; MIRANDA, P. B. 168

PG69 - Plasmonic metasurfaces for enhanced chiroptical effects
SARRIA, J. J. H. ; SALAZAR, J. R. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 169

PG70 - Equações integrais de Yang-Mills
MALAVAZZI, H. ; FERREIRA, L. A. 170

PG71 - Processamentos não-unitários de informação quântica e complexidade
MORAZOTTI, N. A. C. ; NAPOLITANO, R. J. 171

PG72 - Influência da heterogeneidade das características de tarefas na sua execução distribuída em redes complexas
LOPES, M. ; TRAVIESCO, G. 172

PG73 - Condensação de Bose-Einstein em superfície esférica
BERETA, S. J. ; CARACANHAS, M. 173

PG74 - Estudos estruturais sobre complexos de septinas humanas por MET
MENDONÇA, D. C. ; GUIMARÃES, S. L. ; GARRATT, R. C. ; ARAÚJO, A. P. U. ; PORTUGAL, R. V. 174

PG75 - Estudo dos aspectos fundamentais da conjugação das terapias fotodinâmica e sonodinâmica para o tratamento de câncer de pele não-melanoma
AYALA, E. P. ; PRATAVIEIRA, S. ; BAGNATO, V. S. ; ALVES, F. ; GARCIA, M. 175

PG76 - Efeito de decoerência devido a gravidade: uma abordagem por integral de trajetória
AFONSO, R. J. S. ; PINTO, D. O. S. 176

PG77 - Up-conversion luminescence of tellurite glasses doped with rare-earth ions for white light emission
CALDERÓN, G. L. ; OTÁVIO, B. S. ; ROGÉRIA, R. G. ; ANTHONY, G. R. V. ; EUCLYDES, M. J. 177

PG78 - Simulating a Zeeman slower for Rb2 molecules
TORRES, M. L. ; PASSAGEM, H. F. ; CASIQUE, C. M. ; PAUL, E. C. ; CARDOSO, M. ; MARCASSA, L. G. 178

PG79 - Descoberta de derivados 4-quinolinonas como candidatos a fármacos antimaláricos: caracterização da atividade antiplasmodial in vitro, ex vivo e estudo de mecanismo de ação
SOUZA, J. O. ; ALMEIDA, S. ; AGUIAR, A. C. ; OLIVA, G. ; CORREA, A. ; GUIDO, R. 179

PG80 - Realistic g-factors and k.p parameters for III-V semiconductors from 14-band k.p Hamiltonian
BASTOS, C. M. O. ; SILVA, J. F. L. ; SIPAHI, G. M. 180

PG81 - Estudo estrutural e funcional de hidrolases de glicosídeos celulossomais termofílicas envolvidas no processo de hidrólise de biomassa lignocelulósica
ALMEIDA, L. ; SILVA, W. ; MUNIZ, J. 181

PG82 - Non-thermal quantum engine in transmon Qubits
CHERUBIM, C. ; BRITO, F. ; DEFFNER, S. 182

PG83 - Desenvolvimento de um microscópio óptico sem lentes para análise de amostras semitransparentes
D'ALMEIDA, C. P. ; OLIVEIRA, N. P. ; FEITOSA, P. ; PRATAVIEIRA, S. 184

PG84 - Estudos estruturais de uma possível lipase de Bacillus licheniformis
NAKAMURA, A. ; GODOY, A. ; KADOWAKI, M. ; POLIKARPOV, I. 185

PG85 - Phototherapy applied to cellulose and chitosan hydrogels in tissue engineering
ONO, B. A. ; JOHNS, M. ; COURTNEAY, J. ; SANTOS, D. M. ; BUZKEM, A. L. ; CAMPANA-FILHO, S. P. ; SHARMA, R. ; SCOTT, J. L. ; GUIMARÃES, F. E. G. 186

PG86 - Dynamics of matter waves undergoing Bloch oscillations in a ring cavity
BORGES, L. ; COURTEILLE, P. ; BACHELARD, R. 187

PG87 - .Simulação Monte Carlo dos efeitos microfísicos de radiações cósmicas ionizantes no DNA de seres vivos
AGUERA, J. J. M. ; GALANTE, D. ; MARINHO, F. 188

PG88 - Microfabricação com pulsos laser ultracurtos em materiais cristalinos
NOLASCO, L. K. ; ALMEIDA, G. F. B. ; MENDONÇA, C. R. 190

PG89 - The effect of Homeothermy in the evolution of minimal introns
ZUVANOV, L. ; DEMARCO, R. 191

PG90 - Investigação das metodologias de produção de Taq DNA polimerase Hot Start e suas implicações na atividade da enzima
TORRES, N. U. ; BERNARDES, A. ; COSTA, F. C. ; DOTTA, M. A. V. O. ; MALUF, F. V. ; GUIDO, R. V. C. 192

PG91 - The 3-body problem with applications to astrophysics and cosmology
TAKEDA, C. S. ; HARTMANN, B. 194

PG92 - Otimização de um protocolo para a triagem virtual de uma série de compostos que se ligam ao sítio da colchicina na α/β-tubulina
SALCEDO, D. L. P. ; MAGALHÃES, L. G. ; ANDRICOPULO, A. D. 195

PG93 - Hamiltonianos não hermitianos em eletrodinâmica quântica de cavidade
OLIVEIRA NETO, F. ; MOUSSA, M. H. Y. 196

PG94 - Estudo estrutural e funcional das proteínas spliceossomais U5-15K, U5-102K e Prp43 de Tripanossoma brucei
LIMA, A. L. ; SILVA, M. T. A. ; THIEMANN, O. H. 197

PG95 - Techiniques of Optical Trapping Through Generalized Phase Constrast
SILVA, P. ; SEGURA, C. ; MARTINS, T. ; MUNIZ, S. 199

PG96 - Photodynamic inactivation in a molecular-level: a Langmuir monolayer approach
JOCHELAVICIUS, K. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 200

PG97 - Propriedades termodinâmicas de horizontes causais
BARBOSA, M. ; VANZELLA, D. 201

PG98 - Toward a continuous observation of Bloch oscillations of ultracold atoms
MORENO, M. ; KESSLER, H. ; BELI, C. ; SHIOZAKI, R. ; COURTEILLE, P. 202

PG99 - Expressão e purificação das septinas de levedura Cdc3, Cdc10, Cdc11 e Cdc12
GARRATT, R. C. ; SILVA, R. M. 203

PG100 - Stochastic analysis and inference for oscillating chemical reaction networks using the linear noise approximation
ARAUJO, G. ; MAIA, L. 204

PG101 - Estudos estruturais e biofísicos de RAD51 e seus parálogos de Leishmania
LEÃO, M. ; THIEMANN, O. H. 205

PG102 - Comparing the performance of imitative learning algorithm
AQUINO, L. 206

PG103 - Avaliação dos efeitos fotodinâmicos de fotossensibilizadores naturais no desenvolvimento do Aedes aegypti em condições subletais
MEZZACAPPO, N. F. ; SOUZA, L. M. ; GARBUIO, M. ; INADA, N. M. ; BAGNATO, V. S. 207

PG104 - Supercondutores holográficos multi-componentes
APRILE, N. ; HARTMANN, B. 208

PG105 - Optical thermometry based on Nd^{3+}/Yb^{3+}-doped fluorophosphate glasses
FARIA, W. ; GONÇALVES, T. S. ; CAMARGO, A. S. S. 209

PG106 - Aspectos de QCD na rede a temperatura finita
LEAL JUNIOR, J. M. ; MENDES, T. 210

PG107 - Atividades opticas de biomoléculas na presença de nanoestruturas plasmônicas
MAREGA, E. ; MIRANDA, M. M. P. 211

PG108 - Representação e caracterização de circuitos amplificadores através de grafos.
MIRANDA, W. M. 212

PG109 - When clock and system interact: Page-Wootters' mechanism
MENDES, L. ; SOARES-PINTO, D. 213

PG110 - Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos
MARTINS, T. T. ; SEGURA, C. ; SILVA, P. F. ; MUNIZ, S. 214

PG111 - Effects of crosslinking agents on PEDOT:PSS films
SOUZA, R. F. S. ; FARIA, G. C. 215

PG112 - Naegleria spp. Diversity on Monjolinho River Basin – São Carlos, State of São Paulo
BELLINI, N. K. ; THIEMANN, O. H. 216

PG113 - Depletion spectroscopy of ultracold x=0 85Rb2 molecules trapped in a crossed optical dipole trap
PASSAGEM, H. ; MARCASSA, L. 217

PG114 - MRI applications for porous media
CARDOSO, C. ; PAIVA, F. F. ; FOERSTERA, B. U. 218

PG115 - Síntese e caracterização de potenciais inibidores da diadenilato ciclase de S. aureus: um novo alvo molecular essencial
MENEGHELLO, R. ; NAVARRO, M. V. A. S. 219

PG116 - Desenvolvimento de filmes de Fe_2TiO_5 para a formação de eletrodos aplicados na fotossíntese artificial para geração de hidrogênio solar
CORRÊA, A. S. 220

PG117 - Buracos negros e soluções compactas em teorias escalar-tensoriais da gravidade
CONSOLE, F. ; HARTMANN, B. 221

PG118 - Análise de padrões e propriedades na modelagem de redes proteína-proteína
GAMBOA, C. A. G. ; BRUNO, O. M. 222

PG119 - Férmions de Majorana e supercondutores topológicos
ARAÚJO, R. N. ; EGUES, J. C. 223

PG120 - Estratégias em modelagem molecular e avaliação biológica para uma série de candidatos à fármacos para a leishmaniose
TELES, H. ; ANDRICOPULO, A. D. 224

PG121 - Photodynamic inactivation applying at S. aureus biofilm developed at endotracheal tube
ZANGIROLAMI, A. C. ; INADA, N. ; BAGNATO, V. ; BLANCO, K. C. 225

PG122 - Produção de nanocelulose: processo de isolamento da celulose através do pré-tratamento ácido - alcalino.
KANE, A. O. 226

PG123 - Estratégias em quimioinformática para uma série de compostos antichagásicos
MEDEIROS, A. R. ; ANDRICOPULO, A. D. 227

PG124 - FlowMR: um protótipo baseado no modelo a fluxo de dados, escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo
TEIXEIRA, J. ; RUGGIERO, C. A. ; MATIAS, P. 228

PG125 - Decontamination of circulating fluid with ultra-violet applied in foods
OLIVEIRA, B. P. ; BLANCO, K. ; BAGNATO, V. S. 230

PG126 - Aplicações de Ressonância Magnética Nuclear ao estudo de rochas reservatório utilizando polarização nuclear dinâmica
SÁ, A. A. C. ; BONAGAMBA, T. ; MONTRAZZI, E. 231

PG127 - Transporte coerente de luz em amostras atômicas ordenadas e desordenadas
FERNANDEZ, M. F. 232

PG128 - Aspectos da QCD na rede à temperatura finita
CERQUEIRA, M. ; MENDES, T. 233

PG129 - Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas
LUCHESI, A. C. ; BRUNO, O. 234

PG130 - Estudos estruturais de glicosiltransferases envolvidas na síntese de biofilmes em Enterococcus faecalis
CLEMENTINO, L. O. D. 235

PG131 - Investigation of superfluid properties in quantum degenerate mixture of sodium and potassium: gray molasses implementation
SALCEDO, E. G. I. ; MAZO, P. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; FARIAS, K. M. ; TAVARES, P. E. S. ; SCARPIN, J. A. ; AUGUSTO NETO, G. ; CASTILHO, P. C. M. ; OLIVEIRA, G. A. 236

PG132 - FlowMT — Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores many-core
FERREIRA, F. ; TRAVIESO, G. ; RUGGIERO, C. A. 237

PG133 - Complex networks computational modeling of visual attention
FERREIRA, S. ; COSTA, L. 238

PG134 - Avaliação dos efeitos estruturais e funcionais de diferentes inibidores da glutaminase C
TANIMOTO, C. ; AMBROSIO, A. L. B. 239

PG135 - Estudo de simetria em Hamiltonianos k.p
OLIVEIRA, C. E. 240

PG136 - Study of the interaction dynamics of three different types of curcumin in planktonic cultures of three different bacterias
PINTO, F. F. J. ; GUIMARÃES, F. E. G. 241

PG137 - Using neural networks to forecast stock prices on simulated data
SOUZA, H. R. ; MAIA, L. 242

PG138 - Clonagem e caracterização de enzimas identificadas no secretoma do fungo termofílico Thielavia terrestris
MULINARI, E. J. ; MUNIZ, J. R. C. ; SEGATO, F. 243

PG139 - Biologia estrutural e busca por ligantes para a proteína NS5 do vírus da Zika
OLIVEIRA, K. I. Z. ; MESQUITA, N. C. M. R. ; ZUNIGA, G. A. L. ; GODOY, A. S. ; DIAS, M. V. B. ; OLIVA, G. 244

PG140 - Distribuições angulares no decaimento tau a K pi neutrino
NEVES, G. A. ; BOITO, D. 245

PG141 - Tomografia de estado quântico via Ressonância Magnética Nuclear de núcleos quadrupolares isolados
ESTRADA,, R. R. A. ; BONAGAMBA,, T. T. J. ; LEAL, A. C. S. ; OLIVEIRA, E. E. L. ; FERREIRA, A. G. A. 246

PG142 - Estudo sobre assimetria mútua e o mecanismo da Page-Wootters
CARMO, R. S. ; PINTO, D. O. S. 247

PG143 - Caracterização bioquímica e biofísica de uma esterase de Bacillus licheniformis
POLIKARPOV, I. ; LEITE, A. E. T. 248

PG144 - Circulação de massa em BECs espinoriais no regime de grandes comprimentos de onda
DONATO, M. H. F. ; MUNIZ, S. 249

PG145 - Emulador para o espectrômetro digital do CIERMag
SOUZA, P. V. B. D. ; TANNÚS, A. ; MARTINS, M. J. ; VIDOTO, E. L. G. 250

PG146 - Learning Analytics e metodologias ativas como ferramenta de apoio à modernização e análise em cursos de Física e Engenharia
MARTINS, R. D. S. ; MUNIZ, S. ; ONO, B. A. 251

PG147 - Caracterização estrutural das enzimas da via de biossíntese da vitamina B6 em Staphylococcus aureus
BARRA, A. L. C. ; NASCIMENTO, A. S. 252

PG148 - Estudo da via de biossíntese da vitamina B1 de bactérias como alvo para desenvolvimento de novos antibióticos
GUTIERREZ, R. F. ; WRENGER, C. ; NASCIMENTO, A. S. 253

PG149 - Perfil energético do movimento de abertura e fechamento da lisozima do vírus T4 por dinâmica molecular
SOUSA, S. C. ; NASCIMENTO, A. S. 254

PG150 - Expressão e purificação de mono oxigenase lítica de polissacarídeo
HIGASI, P. ; ARNOLDI, V. ; POLIKARPOV, I. 255

PG151 - Representações geométricas de grafos com aplicações.
RESENDE, B. M. F. ; COSTA, L. F. 256

PG152 - Condensados com vórtices armadilhados no bubble trap
TOMISHIYO, G. ; CARACANHAS, M. 257

PG153 - Strain em semicondutores III-V politípicos
SIQUEIRA, A. ; SIPAHI, G. 258

PG154 - Controle da não Markovianidade pela dissipação de um qbit
LIMA, R. B. B. ; BRITO, F. B. ; PINTO, D. O. S. ; AZEVEDO, E. R. ; FILGUEIRAS, J. G. 259

PG155 - Efeitos toxicológicos induzidos por nanopartículas de óxido de grafeno e óxido de cério em Ceriodaphnia silvestrii
TUESTA, M. A. M. ; ZUCOLOTTO, V. 260

PG156 - Vidros fosfatos de íons alcalinos e alcalinos terrosos
MORGUETTO, G. F. 261

PG157 - Propriedades ópticas não-lineares e magneto-ópticas de vidro germanato dopado com térbio na forma bulk e fibra
HENRIQUE, F. R. ; ALMEIDA, J. M. P. ; FRANCO, D. F. ; NALIN, M. ; MENDONÇA, C. R. 262

PG158 - Efeitos de desordem em certos magnetos frustrados
MIRANDA, M. M. J. ; HOYOS, J. A. 263

PG159 - Statistical randomness tests with the TestU01 library for a hardware random number generator
CATANANTE, V. A. A. ; MERENDA, J. V. ; BATISTA NETO, J. E. S. ; BRUNO, O. 264

PG160 - Estudos biofísicos e estruturais das septinas de Drosophila melanogaster
FERNANDES, A. ; LEONARDO, D. ; PEREIRA, H. ; GARRATT, R. C. 265

PG161 - Influência do progresso tecnológico e renovabilidade na sustentabilidade do ecossistema populações de engenheiros
LOPES, G. ; FONTANARI, J. F. 266

PG162 - Elementos do grupo 13 em Biovidros: uma análise pela técnica de rotação no ângulo mágico
SANTOS, M. L. 267

PG163 - Correlating morphology and geochemistry at the nanoscale with synchrotron imaging
PERES, L. M. C. ; GALANTE, D. 268

PG164 - Investigation of photoinduced charge generation in surface-immobilized metal-organic-frameworks (SURMOFs) based on porphyrin derivatives and C60
LIMA, J. ; MIRANDA, P. B. 269

PG165 - Low-cost disposable screen-printed carbon based microfluidic electrochemical device for early diagnosis of colorectal cancer
NASCIMENTO, G. F. ; MATERON, E. M. ; REDIN, G. G. I. -. ; FARIA, R. C. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 270

PG166 - Photodegradation kinetics of Indocyanine Green in the infrared region
TOVAR, J. S. D. ; KASSAB, G. ; INADA, N. ; BAGNATO, V. ; KURACHI, C. 271

PG167 - Mode filtering effect in graphene oxide-doped microcavities fabricated by two-photon polymerization via direct laser writing
TOMAZIO, N. B. ; PAULA, K. T. ; HENIQUE, F. R. ; RODRIGUEZ, R. D. F. ; ANDRÉS, M. ; MENDONCA, C. R. 272

PG168 - Caracterização estrutural da proteína nsP4 RNA polimerase RNA-dependente do vírus Chikungunya e busca por agentes antivirais
FREIRE, M. C. L. C. ; GODOY, A. S. ; BUENO, R. V. ; OLIVA, G. 273

PG169 - Effects of antineoplastic agents delivery by plasma membrane-derived nanoparticle on neoplastic cells and immunoregulatory properties on professional antigen presenting cells.
COMPARETTI, E. ; ZUCOLOTTO, V. 274

PG170 - Automação de um frontEnd de RMN para controle de periféricos em baixa velocidade
MONTES, R. S. 275

PG171 - Caracterização de proteínas relacionadas à síntese e degradação do segundo mensageiro c-di-GMP em Pseudomonas aeruginosa
DELPHITO, L. ; NAVARRO, M. 276

PG172 - Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente
FORTUNATO, T. C. ; MORIYAMA, L. T. 277

PG173 - Isolantes topológicos
ZANON, J. ; EGUES, J. C. 278

PG174 - Toxicidade e respostas bioquímicas em Daphnia magna exposta a nanopartículas de óxido de cobre e de platina
ANDRADE, L. S. ; CHIQUITO, J. G. G. ; ZUCOLOTTO, V. ; DORNFELD, A. S. M. 279

PG175 - Construction of a quantum degenerate mixture of sodium and potassium atoms to produce quantum turbulence
GUTIERREZ, E. D. M. ; MAZO, P. ; SALCEDO, E. G. I. ; FARIAS, K. M. ; BAGNATO, V. S. 280

PG176 - Fontes Locais de Raios Cósmicos Ultra Energéticos
OLIVEIRA, C. ; SOUZA, L. V. 281

PG177 - Artificial neural networks and complex networks: an integrative study of topological properties and pattern recognition
SCABINI, L. ; BRUNO, O. 282

PG178 - Skyrmions auto duais a partir do ansätze conforme e mapa racional
LIVRAMENTO, L. R. ; FERREIRA, L. A. 283

PG179 - Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas humanas
LEONARDO, D. A. ; NASCIMENTO, A. ; ANDRÉ, I. ; VALADARES, N. ; WATANABE, T. ; USON, I. ; GARRATT, R. C. 284

PG180 - Buracos negros primordiais interagindo com cordas cósmicas
GREGORIO, G. ; HARTMANN, B. 285

PG181 - Development of a technique combining photobiomodulation and radiotherapy to enhance the tumoral response to ionizing radiation
FARIA, C. ; PRATAVIEIRA, S. ; INADA, N. M. ; BAGNATO, V. S. 286

PG182 - Diagnóstico de doenças em citros por meio de DeepLearn combinado a imagens de espectroscopia de fluorescência
NEVES, R. ; WETTERICH, C. ; SOUSA, E. P. M. ; MARCASSA, L. 287

28

IC1

Avaliação da disseminação do gene blaKPC carreado em ambiente genético independente de Tn4401 em bactérias gram negativas

SILVA, G. V. ; BORALLI, C. ; CAMARGO, I. L. B. C.

geovana.silva13@gmail.com

A produção da Klebsiella pneumoniae carbapenemase (KPC) é um importante mecanismo de resistência aos carbapenêmicos, não somente em Klebsiella pneumoniae onde foi inicialmente descrita, mas também em outras bactérias da ordem Enterobacterales. Contudo, pouco se sabe sobre a disseminação do gene blaKPC nestas outras espécies. No Brasil, a enzima KPC foi relatada inicialmente em K. pneumoniae, no Recife, em 2006, mas atualmente se encontra disseminada pelo país, onde sua incidência tem aumentado significativamente. A mobilidade do gene blaKPC é predominantemente atribuída ao Tn4401, ambiente genético móvel encontrado mundialmente no qual o gene foi originalmente descrito, e aos plasmídeos conjugativos que o alberga. Portanto, o objetivo desse trabalho foi selecionar bactérias gram negativas do hospital Dr. João Lúcio Pereira Machado/AM, produtoras da enzima KPC, avaliar a ocorrência do gene blaKPC e estudar o ambiente genético que o carreia. Assim, 43 amostras bacterianas foram avaliadas quanto à viabilidade e ao perfil de resistência aos antibióticos da classe carbapenêmicos (Ertapenem, Meropenem e Imipenem) pelo método de disco difusão. Cerca de 59 % das bactérias apresentaram resistência a pelo menos um antibiótico dessa classe. Posteriormente, extraímos o DNA das amostras possíveis produtoras de KPC e, por PCR, identificamos o gene blaKPC e caracterizamos o ambiente genetico com primers baseados no Tn4401 previamente descritos(1)e no NTEKPC encontrado por nosso grupo em um estudo preliminar em K. penumoniae do mesmo hospital. Identificamos 10 bactérias Acinetobacter baumannii complex com o gene blaKPC, contudo nenhuma delas apresentaram os ambientes genéticos pesquisados. Portanto, este estudo demonstra a alta diversidade de elementos genéticos disponíveis abrigando blaKPC, enfatizando a continuada recombinação e evolução de plasmídeos.

Referências:

1 NAAS, T. *et al.* Genetic structures at origin of acquisition of the β-Lactamase blaKPC gene. **Antimicrobial Agents Chemother** ,v.52, n.4, p.1257-63,2008.

IC2
Liberdade assintótica na seção de choque $e^+e^- \to (\text{hádrons})$

RODRIGUES, M. V.
marcus.gonzalez.rodrigues@usp.br

Uma das principais quantidades mensuráveis da Cromodinâmica Quântica (QCD) é a seção de choque inclusiva de produção de hádrons em colisões e^+e^-. Usualmente, nestes estudos é utilizado o observável $R(s)$, definido pela razão entre a seção de choque de e^+e^- em hádrons e a seção de choque na produção de múons.A representação teórica do observável $R(s)$ é obtida, para energias suficientemente altas, $\sqrt{s} > 1.5$ GeV, e longe de ressonâncias, como uma expansão pertubativa no acoplamente forte α_s. O observável, portanto, pode ser escrito em termos de uma série de potências em α_s, incluindo as correções devida às massas dos quarks e as correções não pertubativas relativamente pequenas codificadas nos condensados da expansão em produto de operadores (OPE).(1) Uma das principais características das correções perturbativas está na liberdade assintótica da QCD: o valor do acoplamento forte, α_s, depende da escala de energia e tende a zero para energias muito altas. Neste trabalho estudaremos tanto o cálculo de $R(s)$, em ordem α_s incluindo a correção devida às massas, como a evolução de α_s determinada pela função β da QCD. O objetivo final é o de se comparar determinações a um loop de α_s feitas com dados reais a diferentes energias, e assim obter um teste quantitativo, baseado em dados experimentais, da liberdade assintótica da QCD.

Referências:

1 TANABASHI, M. *et al.* Review of Particle Physics: Particle data group, **Physical Review D** , v.98, n.3, p. 030001,2018.

IC3

Effects of electron correlation in two-electron atoms in a two-dimensional system

FIGUEIREDO, B. ; GUO-QIANG, H.

benjamin.figueiredo@usp.br

Two-electron atoms, such as the negatively charged hydrogen ion (H-) and helium atom (He) have played an important role in the development of theoretical physics in the last century.The quantum state of two paired electrons in such an atom is different in its nature from the single-electron state because of the strong electron correlation. It is a formidable task to determine the correlation energy accurately in this two-electron system. For instance, very recently, using high-precision variational calculations Estienne *et al.*(1) determined the critical nuclear charge $Z_c = 0.911028224\ 077255\ 73(4)$ which is the minimum charge required to bind two electrons.When a two-electron atom is confined in a two-dimensional (2D) system, the electron correlation is significantly enhanced and new effects appear. A two-electron atom in 2Dis not only a model system for studying the negatively charged donor impurity center and charged exciton confined in semiconductor quantum wells, but such electron pair states in a 2D lattice may also form an electron-pair energy band (2)being possibly related to the mechanism of the unconventional superconductivity.Though two-electron atoms in 2D system have been extensively studied, we notice thata systematic investigation on the correlation effects in this system has not been reported.In this work, we have performed a theoretical study on the ground state of the two-electron atoms in 2D. The calculation is aimed to obtain the ground-state energy within reasonable precision but with the wavefunction being of as simple expression as possible. We start with a three-parameter variational function (3), and it is then extended to a superposition with N terms. In order to obtain the electron correlation energy, calculation within the Hartree-Fock approximation has also been done. The electron correlation energy of the two-electron atoms in 2D is obtained as a function of the nuclear charge Z, and an quantitative comparison with that in a 3D system is presented. We find that the minimum nuclear charge required to bind a two-electron atom in 2D is much smaller being $Z_c \approx 0.809$, whereas the value of this critical charge increases to 1.18 within the Hartree-Fock approximation without electron correlation.We have also assumed that the effective interactions between the constituents of a two-electron atom are given by Thomas-Fermi potentials and investigated the screening effects in this system. The obtained results are compared with our quantum Monte Carlo calculations for a two-electron atom embedded in a 2D electron gas.

Referências:

1 ESTIENNE, C. S. *et al.* Erratum: Critical nuclear charge for two electron atoms. **Physical Review Letters** ,v. 113,n.3, p.039902, 2014. 2 HAI, G. Q. *et al.*Electron pairing: from metastable electron pair tobipolaron. **Journal of Physics Communications** , v. 2,n.3, p.035017, 2018. 3 HOGAASEN, H.; RICHARD, J.M.; SORBA, P. Two-electron atoms, ions, and molecules. **American Journal of Physics** , v. 78, n.1, p.86, 2010.

IC4

Produção de anticorpos monoclonais do HIV para entrega direcionada de imunoconjugados

CUNHA, G. D. G. ; GUIMARÃES, F. E. G.
giulia.giacomo.cunha@usp.br

O HIV - vírus da imunodeficiência humana - é o causador da AIDS, doença sexualmente transmissível que acomete os portadores do vírus de modo a atacar o sistema imunológico do paciente, cujo organismo não consegue se livrar desse. Atualmente não é conhecida nenhuma cura e a terapia mais comum é a antirretroviral (cART), mas apenas aproximadamente 55% dos soropositivos têm acesso a esse tratamento, indicando que o estudo de novas abordagens terapêuticas é indicado, como o desenvolvimento de novas formas de imunoterapia. Como proposta de imunoterapia, ao conectarmos um anticorpo monoclonal (mAb) à citotoxinas a partir de ligações estáveis desenvolvemos imunoconjugados direcionados às proteínas do envelope do HIV - gp120 e gp41 - levando assim à morte específica das células infectadas pelo vírus. (1) Nesse projeto buscamos desenvolver e caracterizar anticorpos monoclonais que possam compor um imunoconjugado eficaz para alcançar células que expressam o envelope celular do vírus HIV (2); na primeira parte do projeto realizou-se a expressão transiente do DNA plasmidial das cadeias dos anticorpos em E. coli DH5-alpha, seguida pela purificação desses anticorpos com aplicação de cromatografia de afinidade com coluna de proteína G. Na segunda parte, os anticorpos e conjugados - tanto de anticorpos com marcadores fluorescentes quanto de anticorpos com fotossensibilizadores - foram caracterizados a partir da análise de experimentos de espectrofotometria e de microscopia, que nos forneceram informações referentes à concentração de anticorpos e conjugados, adesão e absorção dos anticorpos às células alvo e degradação celular das mesmas. Os resultados obtidos durante a primeira etapa do projeto indicaram as dificuldades presentes na produção dos anticorpos, de forma que os protocolos pudessem ser otimizados e os problemas encontrados fossem resolvidos; enquanto os resultados obtidos na segunda parte nos forneceram dados relevantes para o desenvolvimento de protocolo de tratamento adequado à essa imunoterapia.

Referências:

1 LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY. **HIV sequence database** . Disponível em: https://www.hiv.lanl.gov/content/sequence/HIV/MAP/landmark.html. Acesso em: 3 jan. 2019. 2 PACIFIC IMMUNOLOGY. **Polyclonal vs monoclonal antibodies** . Disponível em: https://www.pacificimmunology.com/resources/antibody-introduction/polyclonal-vs-monoclonal-antibodies. Acesso em: 6 jan. 2019.

32

IC5

Evaluating potential inhibitors of Aβ aggregation for treatment of Alzheimer's disease

QUATRONI, F. D. ; SAMPAIO, I. ; ZUCOLOTTO, V.
felipequatroni@uol.com.br

Alzheimer's disease (AD) is a type of dementia very common in individuals older than 65 years, characterized by memory loss and cognitive disorders. According to the ADI (Alzheimer's Disease International), in 2018 about 35 million people in the world was diagnosed with this neurodegenerative disorder (1). Several studies correlate AD with the accumulation of the β-amyloid peptide (Aβ) in the brain, which aggregate in fibrillar plaques around the neurons. Many treatments have been proposed to interrupt the synthesis of Aβ and/or to degrade them, however, recently a study showed that Aβ protects the brain against the infection of microorganisms that can pass through the blood-brain barrier (2). Treatments that only prevent the aggregation of Aβ42, represent a more adequate and less harmful alternative. In 2009, a study by Harrison *et al*, showed a higher amount of amyloid plaques in the brains with ascorbic acid (AA) deficiency (3), indicating that AA could have some effect on Aβ42 aggregation. In this study we investigate the role of AA on Aβ42 aggregation. Peptide samples were incubated with and without AA and analyzed at 24h intervals. Thioflavin T (ThT) fluorescence measurements were performed to quantify the amyloid fibrils by labeling β-sheet secondary structures. The ThT fluorescence analyses showed a very significant decrease in the quantity of β-sheet secondary structures for the samples incubated with AA, pointing out for an inhibitory effect of AA on the formation of amyloid fibrils. These results were confirmed by atomic force microscopy (AFM) images. Our study showed that AA inhibited the β-amyloid aggregation and, therefore, has a huge therapeutic potential for Alzheimer's disease since the protective function of Aβ can be preserved

Referências:

1 ALZHEIMER'S DISEASE INTERNATIONAL **World Alzheimer Report 2018** . Available at: https://www.alz.co.uk/research/WorldAlzheimerReport2018.pdf.Accessed on: January, 2019. 2 KUMAR, D.K.V. *et al*. Amyloid-β peptide protects against microbial infection in mouse and worm models of Alzheimer's disease. **Science Translational Medicine** , v.8, n. 340, p. 340-372., 2016. 3 HARRISON, F.E. *et al*. Antioxidants and cognitive training interact to affect oxidative stress and memorry in APP/PSEN1 mice. **Nutritional Neuroscience** , v.12, p.203-218, 2009.doi: 10.1179/147683009X423364.

33

IC6

Turn-on fluorescence study of a highly selective chemosensor for Zn2+

NUNES, M. C. C. ; CARLOS, F. S. ; GALINDO, D. D. M. ; BONI, L. ; ABATE, G. ; NUNES, F. S.
danyellen.galindo@usp.br

Chemical sensors for molecules, ions or protons are intensively investigated due to their potential applications in many areas such as analytical chemistry, biology and environmental sciences. (1) The fluorescence sensing is attractive high selectivity, low cost compared to other devices, fast response and low detection limit particularly to essential or hazardous metal ions such as Cu, Zn, Hg and Cd for example. It was constructed a chemosensor using a 4,5-bis(aminomethyl)acridine) called LN as organic molecule, in order to detect Zn(II) in aqueous media. The linear properties of the molecule was obtained by a solution of LN dissolved in methanol with a molar concentration of 1x10-3 Molar. Linear absorption and fluorescence emission were performed with a spectrophotometer and fluorimeter in order to determine the excitation spectral region and its emission response. Both measurements were fundamental to indentify the spectral window of detection. In addition, fluorescence quantum yield (FQY) was determined by using well-known Brouwer´s method. (2) This photophysical property is important to quantify the level of sensitivity of the fluorosensor. After this characterization, LN fluorosensor was tested at different aqueous solutions containing different types of metallic cations, such as: Cu, Hg, Cd, Pb, Zn and etc. (3) The results shown that LN fluorosensor was only selective for Zn2+, in which FQY have increased of about 230%. For other cations, the FQY was kept the same as LN alone. The study and characterization of this fluorosensor may help to detect metallic ions in very low quantities in aqueous solutions. Also, one can determine the presence of metals in other systems as in cellular activities, physiological processes and, the most important, detection in the environment that comes from mining activities and industry.

Referências:

1 SIVARAMAN, G. *et al.*, Chemically diverse small molecule fluorescent chemosensors for copper ion. **Coordination Chemistry Reviews** , v. 357, p. 50-104, Feb. 2018. doi: 10.1016/j.ccr.2017.11.020. 2 BROUWER, A. M. Standards for photoluminescence quantum yield measurements in solution. **Pure and Applied Chemistry** , v. 83, n. 12, p. 2213-2228, 2011. 3 NOULAS, C.; TZIOUVALEKAS, M.; KARYOTIS, T. Zinc in soils, water and food crops. **Journal of Trace Elements in Medicine and Biology** , v. 49, p. 252-260, Sept. 2018. doi: 10.1016/j.jtemb.2018.02.009.

34

IC7

Efeitos da temperatura no ritmo de um centro gerador de padrões biológico

REIS, R.

renandosreiss@usp.br

Geradores de padrões centrais (CPGs) são pequenas redes neurais especializadas em produzir padrões periódicos e robustos para controlar atividades rítmicas musculares. Eles trabalham de modo quase autônomos, com influência de moduladores nervosos e químicos que enviam informações sensoriais apenas para sintonizar os padrões a um propósito específico. Um exemplo modelo para estudos de CPGs é o gânglio estomatogástrico (STG) dos crustáceos. O STG é um gânglio responsável pelos movimentos ritmados dos músculos pilóricos de crustáceos e ele tem seu ritmo modulado pelos gânglios comissurais (COGs), além dos sensores táteis no estômago, neurônios descendentes do cérebro do animal e às aminas e neuropeptídios excretados na hemolinfa pelos órgãos pericárdicos. Apesar desses inúmeros moduladores, o sistema apresenta um ritmo robusto a perturbações ambientais, como, por exemplo, a variações de temperatura do corpo ou do sistema nervoso estomatogástrico, do qual o STG e seus moduladores nervosos fazem parte. Estudos anteriores mostram que a frequência do ritmo pilórico aumenta proporcionalmente à temperatura, mantendo a fase dos padrões musculares. (1-2) Este trabalho busca identificar se esse comportamento em relação à temperatura se deve ao STG ou a seus moduladores. Com esse fim, animais da espécie Callinectes sapidus foram imobilizados e, por meio de uma sonda endoscópica e um sistema de aquisição de sinais, foi aferido a frequência de contração dos músculos estomacais do animal, gerado pelo STG, em função da temperatura estomacal, corporal e ambiental a qual o animal está exposto. A sonda endoscópica é composta por um tubo de plástico flexível que comporta espaço para um fluxo incidente de água, um termopar para medição da temperatura estomacal e duas fibras ópticas conectadas, respectivamente, a uma fonte de luz e a um sensor fotovoltaico. Enquanto as medidas de frequência eram coletadas, água à temperatura controlada foi injetada no estômago do animal de forma a expor o STG, localizada nas imediações do estômago, a uma temperatura diferente da temperatura nos COGs, localizados próximos à boca e controlados pela temperatura corporal e bucal. Os dados coletados foram analisados utilizando modelos matemáticos tradicionais, como cálculo do fator Q10, e evidenciam uma relação de independência entre a frequência do ritmo de contração pilórico e o seu gerado, STG, isto é, variações positivas ou negativas da temperatura não causavam alterações no ritmo pilórico. Esses resultados, comparados com estudos anteriores, indicam que a frequência se altera em resposta à temperatura dos sistemas moduladores, relação a ser explorada nos próximos experimentos do projeto. Essa é uma situação muito rara dada a forte correlação entre o funcionamento de sistemas biológicos, principalmente na relação entre músculos e neurônios, com a temperatura. Isso levanta a hipótese de que os diversos processos bioquímicos antagonistas para criar esse padrão tenham relações contrárias à temperatura do STG (3), formando um sistema de compensação local que mantém o ritmo a uma frequência de equilíbrio apesar da temperatura. Esse sistema, então, seria influenciado diretamente pelos neuromoduladores, que possuem sinais dependentes de suas próprias temperaturas e, assim, poderiam modificar a frequência de equilíbrio do CPG pilórico como observado em outros estudos.

Referências:

1 TANG, L. S. *et al.* Robustness of a rhythmic circuit to short- and long-term temperature changes. **Journal of Neuroscience** , v. 32, n. 29, p. 10075-10085, 2012. 2 SOOFI, W.; GOERITZ, M. L.;

KISPERSKY, T. J.; *et al*. Phase maintenance in a rhythmic motor pattern during temperature changes in vivo. **Journal of Neurophysiology** , v. 111, n. 12, p. 2603-2613, 2014. 3 ROBERTSON, R. M.; MONEY, T. G. A. Temperature and neuronal circuit function: compensation, tuning and tolerance. **Current Opinion in Neurobiology** , v. 22, n. 4, p. 724-734, 2012.

36

IC8

Condensados dipolares numa armadilha tipo bolha: modos coletivos

OLIVEIRA, E. A. B. ; HENN, E. A. L.

eduardo.amancio.oliveira@usp.br

Neste projeto, estudamos gases quânticos bosônicos que possuem interação dipolar em armadilhas do tipo bolha, onde os átomos são confinados em uma casca esférica. Tal geometria despertou muito interesse no último ano devido à inauguração de um sistema de experimentação em átomos frios na estação espacial internacional. Em tal sistema experimental pretende-se realizar a configuração da armadilha bolha em átomos sem interação dipolar em ambiente de microgravidade. Apesar do interesse recente, não há na literatura estudo de gases dipolares em tal geometria. Por sua vez, gases dipolares são um dos principais tópicos de pesquisa experimental em átomos frios nos últimos 10 anos, especialmente devido à obtenção experimental de gases quânticos de Érbio e Disprósio, este último a espécie atômica mais magnética da Tabela Periódica. Discorrerei brevemente sobre os resultados que obtivemos para propriedades estáticas do condensado, a saber: energias e distribuições de densidade no equilíbrio. Apresentarei em mais detalhes a minha contribuição no projeto: o cálculo de frequências e energias de excitação para modos coletivos de oscilação do sistema. Esse problema foi atacado por um método denominado sum rule approach (1-2), que nos permite obter, em primeira aproximação, expressões analíticas para frequências de oscilação de um dado modo baseado apenas em valores médios de certos operadores no estado fundamental – operadores que podem ser expressos como comutadores do Hamiltoniano do nosso sistema com o 'operador de excitação' associado ao modo de interesse. Ilustrarei a aplicação do método para modos de monopolo, dipolo e quadrupolo do sistema, discutindo os resultados obtidos e mostrando como eles se comparam com os valores presentes na literatura no limite sem interação dipolar (3) e no regime usual de uma armadilha harmônica cheia. (2)

Referências:

1 STRINGARI, S. Collective excitations of a trapped Bose-condensed gas. **Physical Review Letters** , v. 77, n. 12, p. 2360-2363, Sept. 1996. 2 KIMURA, T.; SAITO, H.; UEDA, M. A variational sum-rule approach to collective excitations of a trapped Bose-Einstein condensate. **Journal of the Physical Society of Japan** , v. 68, n. 5, p. 1477-1480, May 1999. 3 SUN, K. *et al.* Static and dynamic properties of shell-shaped condensates. **Physical Review A** , v. 98, n. 1, p. 013609-1-013609-24, July 2018.

37

IC9

Caracterização do índice de refração não-linear em vidros teluretos

GASPAROTTO, A. ; DIPOLD, J. ; SANTOS, S. ; ALMEIDA, J. ; MENDONÇA, C. R.
andre.gasparotto.pelosi@gmail.com

O desenvolvimento de lasers de pulsos ultra-curtos tem permitido explorar efeitos não-lineares de alta ordem. Esses efeitos permitem o desenvolvimento de materiais com não-linearidades que podem ser usadas para diferentes aplicações, como dispositivos totalmente ópticos, telecomunicação, óptica integrada, etc. Assim sendo, diferentes tipos de materiais são continuamente investigados com o objetivo de desenvolver dispositivos ópticos. Entre esses materiais, vidros são bons candidatos pois suas propriedades ópticas podem ser modificadas com a modificação composição através da adição de alguns elementos, que são escolhidos dependendo da aplicação desejada.(1)Particularmente, vidros teluretos tem recebido atenção graças a algumas propriedades interessantes que eles apresentam, como alta estabilidade mecânica, durabilidade química, grande janela óptica de transparência e altos índices de refração linear e não linear.(2)O óxido de Telúrio não é capaz de se vitrificar com a aplicação de métodos tradicionais. Desta forma, apenas com a adição de outros óxidos como, por exemplo, os de metais de transição, é possível a fabricação de vidros de alta transparência.(3) A incorporação de óxidos de metais de transição em vidros teluretos pode melhorar as características ópticas não-lineares do material. Por exemplo, a introdução de Nb+5 produz um aumento da polarização e da não-linearidade óptica. Já a introdução de B2O3 em vidros teluretos faz com que ocorra um aumento na janela de transparência no infra-vermelho, além de um aumento na resposta óptica não linear do material, exibindo excelentes performance para aplicações não lineares. Motivado pela importância desses vidros como materiais ópticos não-lineares, este trabalho analisa o comportamento do índice de refração não-linear de vidros teluretos contendo B, Nb e Zr na região do visível, infra-vermelho próximo aplicando a Técnica de Varredura-Z (Z-Scan) utilizando pulsos ultra-curtos, com o objetivo de entender a influência desses óxidos de metal de transição na não linearidade dos materiais.

Referências:

1 VEERAMOHAN RAO,M. *et al.* Z-scan studies of Barium Bismuth Borate glasses. **Optical. Materials,** v.84, p. 178-183, 2018.doi:10.1016/j.optmat.2018.06.066. 2 MIEDZINSKI, R. *et al.* Scan measurements of the third-order optical nonlinearities and linear optical properties of 70TeO2 – MxOy – 10P2O5 – 10 ZnO – 5PbF2 glasses doped with Er3+ ions modified by transition metals. **Optical Materials** , v. 85, p. 48-54, 2018.doi: 10.1016/j.optmat.2018.08.033. 3 XU, T. *et al.* Glass formation and third-order optical nonlinear properties within TeO2-Bi2O3-BaO pseudo-ternary system. **Journal of Non-Crystalline Solids** , v.357, p. 2219-2222, 2011.doi: 10.1016/j.jnoncrysol.2010.12.007.

38

IC10

Síntese e caracterização de novas formas sólidas cristalinas de antidepressivos através do planejamento racional

CECILIO, N. G. ; ELLENA, J. A.
nataliageraldo@msn.com

Estudos recentes apontam que nas duas últimas décadas, cocristais atraíram atenção da indústria farmacêutica e vários deles foram pesquisados. (1) Durante este trabalho, objetivou-se planejar, obter e caracterizar novas formas multicomponentes sólidas cristalinas do antidepressivo da classe dos Inibidores Seletivos de Recaptação de Serotonina, a Paroxetina (PRX), atualmente a depressão e transtornos relacionados atingem aproximadamente quase 5% de toda a população mundial, e no Brasil, o país mais depressivo da américa latina, quase 6% de habitantes sofrem com essa doença. (2) Assim, visa-se modular as propriedades físico-químicas da PRX com base nos Princípios da Engenharia de Cristais, a qual é utilizada no controle de qualidade assim como outros fatores biotecnológicos envolvidos no desenvolvimento de um fármaco. (3) Realizou-se uma análise estrutural do insumo farmacêutico ativo (IFA) PRX e em seguida a busca de coformadores com base nas formas sólidas já reportadas no *Cambridge Structural Database* (CSD). Para iniciar os testes de cristalização, o primeiro protocolo foi realizado a partir da patente U.S. No. 4.007.196 e EP-B-O 223 403, onde a base livre do Cloridrato de Paroxetina 0.5 H2O foi extraída e, em seguida, reagida em proporções estequiométricas com alguns coformadores escolhidos através do planejamento racional, utilizando como solvente álcool etílico. Outra estratégia para a otimização da cristalização foi através do protocolo que está sendo desenvolvido por troca iônica. Pretendeu-se obter monocristais viáveis diretamente pela técnica de evaporação de solvente a 25 °C. Para a determinação da pureza do IFA material de partida, realizou-se difração de raios-X em pó (DRXP) enquanto as amostras obtidas foram analisada termicamente pelas técnicas de calorimetria exploratória diferencial (CED), termogravimetria (TG) e microscopia termo-óptica (MTO, *Hot-Stage*). Analisou-se as amostras obtidas para verificação das propriedades que obteve-se em relação aos matérias de partida, podendo ou não indicar uma nova forma sólida.

Referências:

1 THAKURIA, R. *et al.* Pharmaceutical cocrystals and poorly soluble drugs. **International Journal of Pharmaceutics** , v. 453, n. 1, p. 101-125, 2013. 2 GRACIOLI, J. Brasil vive surto de depressão e ansiedade. **Jornal da USP** , 23 ago. 2018. Disponível em: https://jornal.usp.br/atualidades/brasil-vive-surto-de-depressao-e-ansiedade/. Acesso em: 10 maio 2019. 3 ARAUJO, G. L. B *et al.* Polimorfismo na produção de medicamentos. **Revista de Ciências Farmacêuticas Básica e Aplicada** , v. 33, n. 1, p. 27- 36, 2012.

39

IC11
Uma introdução à teoria dos twistors

CASTRO, T. ; MENCATTINI, I.
thales.castro@usp.br

A teoria dos twistors foi introduzida por Roger Penrose no início da década dos anos sessenta do século passado como uma descrição alternativa do espaço-tempo. Essa descrição, que tem como ponto de partida por um lado a chamada correspondência de Klein e por outro a invariância conforme das equações de Maxwell (1) foi usada por Penrose e seus colaboradores como uma ferramenta para unificar a teoria dos campos quânticos com a relatividade geral. Apesar de a tentativa não ter sido bem sucedida, principalmente por via das dificuldades matemáticas encontradas, a teoria dos twistors teve, e ainda tem, um papel importante em muitas áreas da matemática pura, como a teoria de Lie e a geometria diferencial, e da fı´sica-matemática, como os sistemas integráveis e a teoria de campos. Em particular o interesse de uma parte da comunidade dos físicos teóricos na teoria dos twistors foi despertado em 2003, quando Edward Witten sugeriu como usá-la para obter uma descrição das amplitudes de espalhamento de uma teoria de calibre (perturbativa). Esse foi o ponto de partida de uma nova linha de pesquisa na área da fisica teórica das partı´culas, que ainda hoje é muito ativa e que vê os métodos da teoria dos twistors como uns dos ingredientes principais para investigar o comportamento assintótico da funções de correlação das teorias perturbativas de campo quântico.

Referências:

1 WARD, R. S.; WELLS JUNIOR, R. O. **Twistor geometry and field theory** . Cambridge: Cambridge University Press, 1995. (Cambridge Monographs on Mathematical Physics).

IC12
Maleabilidade de redes complexas para topologias variadas

FURUTA, R. H. M.
roberto.furuta@usp.br

A dinâmica de redes é um assunto de grande interesse científico, uma vez que grande parte de sistemas estudados evoluem com o passar do tempo. Em 2018, foi proposta a medida de rede nomeada maleabilidade para quantificar, a partir de um estado inicial, a distribuição de valores de uma outra medida específica perante um tipo de perturbação de rede. (1) Neste trabalho, será estudado o comportamento da maleabilidade de diferentes medidas perante diversas perturbações em redes reais e modelos. Pretende-se também avaliar a evolução da maleabilidade no modelo dinâmico de Kuramoto. (2) Até o momento, foi estudada a maleabilidade do clustering médio perante a remoção sucessiva de arestas. Esta apresentou um comportamento crescente suave quando a aresta removida conserva a quantidade de estados possíveis e uma queda brusca quando a aresta removida reduz a quantidade de estados possíveis.

Referências:

1 SILVA, F. N.; COMIN, C. H.;COSTA, L. F. **Malleability of complex networks** . 2018. Disponivel em: https://arxiv.org/abs/1810.09602. Acesso em: 12 jun. 2019. 2 ACEBRÓN, J. A. *et al.* The Kuramoto model: a simple paradigm for synchronization phenomena. **Reviews of Modern Physics** , v. 77, n. 1, p. 137-185, 2005.

41

IC13

Avaliação do controle microbiano através de técnicas fotônicas em solução de preservação de órgãos para transplante

BORGES, A. G. C. ; VOLLET FILHO, J. D.

ana.gabriela.borges@usp.br

Pacientes que possuem algum órgão debilitado e necessitam de transplante, enfrentam uma fila de espera muito grande pois há pouquíssimos doadores. Quando a doação ocorre em caso de morte, o órgão é adequado apenas quando ocorre morte encefálica. (1) Para a preservação do órgão antes da cirurgia de transplante, este fica armazenado em uma solução de preservação que é capaz de mantê-lo funcionando, pois sua maior composição é de proteínas, e estas tornam as células impermeáveis, impedindo o inchaço das células e uma possível lise celular. (2) Um dos fatores que minimizam o número de órgãos disponíveis para o transplante é a contaminação microbiana. Nosso grupo desenvolveu um sistema para irradiação do líquido de preservação circulante para a inativação microbiana por radiação UVC ou terapia fotodinâmica. (3) Testes de inativação bacteriana foram realizados em solução tampão fosfato e em solução de preservação Custodiol® com a bactéria *Staphylococcus aureus* , que circulou em um circuito de tubos de silicone conectados à uma bomba de circulação e à um tubo de quartzo. O tubo de quartzo foi irradiado por 4 lâmpadas de mercúrio de baixa pressão UVC de 254 nm com potência de 4 W cada. O ciclo de irradiação durou por 60 minutos com coletas feitas no tempo 0 min; 1 min; 5 min; aumentando com intervalo de 5 min até os 20 min de irradiação, e depois aumentou com intervalo de 10 min até os 60 min. As coletas foram diluídas em série e colocadas em placas de Petri contendo meio BHI (Brain Heart Infusion), com crescimento de 24h a 37º C. Obteve-se gráficos de UFC/mL em função da energia entregue ao tubo de quartzo em J/mL. Realizou-se também testes de verificação do crescimento de *Staphylococcus aureus* em solução Custodiol® irradiada por luz a 660 nm (luz vermelha) durante 120 minutos. Coletou-se 5 amostras, com intervalo de 30 minutos entre elas, realizou-se a diluição em série e colocou-as para crescer em meio BHI ágar, a 37º C por 24h. O teste de inativação por UVC em solução tampão fosfato resultou em uma diminuição da ordem de 10^5 UFC/mL, já o teste em solução de preservação Custodiol® resultou em uma diminuição da ordem de 10^3 UFC/mL. O crescimento de células viáveis das amostras irradiadas por luz a 660 nm mostrou-se aproximadamente constante, confirmando que na irradiação por luz a 660 nm de uma amostra bacteriana sem a presença de fotossensibilizador não há inativação. Medidas de absorbância foram feitas na solução de preservação irradiada por UVC sem a presença de Staphylococcus aureus, obtendo-se um aumento aproximadamente linear de 1,4 de absorbância entre o 0min e 60 min de irradiação. Estes resultados mostram que a técnica de radiação UVC é uma alternativa à inativação de bactérias sem ser preciso do uso de antibióticos e uma das possíveis soluções para o número reduzido de doadores em contraste com a enorme fila de receptores de transplante, tornando órgãos que antes estavam contaminados aptos à serem transplantados.

Referências:

1 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE TRANSPLANTE DE ÓRGÃOS. Dados númericos da doação de órgãos e transplantes realizados por estado e instituição no período: janeiro/março - 2018. **Registro Brasileiro de Transplantes** , ano XXIV, n. 1, 2018. Disponível em: http://www.abto.org.br/abtov03/Upload/file/RBT/2018/rbt2018-leitura.pdf. Acesso em: 6 nov. 2018. 2 LEE, C. Y.; MANGINO, M. J. Preservation methods for kidney and liver. **Organogenesis** , v. 5, n. 3, p. 105-112, 2009. 3 SILVA, C. A. S. *et al.* Evaluation of ultraviolet radiation to control

microorganisms adhering to low-density polyethylene films. **Brazilian Journal of Microbiology** , v. 34, n. 2, p. 175-178, 2003.

IC14

Construção de amplificadores laser para utilização no aprisionamento de átomos

MARTINEZ, V. J. ; HENN, E. A. L.
vinicius.martinez@usp.br

Experimentos de Física Atômica e Molecular onde há aprisionamento e resfriamento de átomos contém, via de regra, um elemento fundamental: o uso de lasers. (1) No entanto são equipamentos caros e complexos. Um dos mais comuns e, de fato, mais efetivos do ponto de vista de custos são lasers de semicondutores, comumente amplificados a fim de fornecer potência suficiente para os experimentos. Porém, tais lasers custam facilmente US$ 50.000 ou mais dependendo da potência necessária e dos comprimentos de onda exigidos nos experimentos. Portanto, é viável adquirir lasers comerciais mais baratos e menos potentes e montar os amplificadores a partir de peças feitas em oficinas ou adquiridas separadamente. Este tipo de estratégia diminui o custo de um laser facilmente em mais de 50%. Além disso, esta estratégia é escalonável: a partir de um único laser "semente" pode-se montar um número grande de amplificadores e produzir muito mais potência do que sistemas comerciais tradicionais por uma fração do valor. Para a construção do amplificador óptico, foi usado um laser comercial operante no laboratório como laser semente e um chip amplificador do tapered amplifier (TA), que, foi montado em uma carcaça de laser inativo, aproveitando para isso a estrutura mecânica, eletrônica e óptica. A potência do laser "semente" pode ser amplificada em mais de 2000%, dependendo da potência de entrada e da corrente aplicada no TA, tornando-se suficiente nas aplicações de aprisionamento de átomos.

Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Laser e suas aplicações em Ciência e Tecnologia** . São Paulo: Livraria da Física, 2008.

IC15

Expressão de proteínas de capsídeo de circovírus suíno (Porcine Circovirus - PCV) 1 e 3.

ROCHA, T. S. ; SALA, F. A. ; THIEMANN, O. H.
tamiris.roc@gmail.com

O circovírus suíno (PCV) é o principal causador da síndrome de emaciação multissistêmica pós-desmame (PMWS). Três espécies são conhecidas atualmente, denominadas PCV1, PCV2 e mais recentemente PCV3. PCV1 não causa patologia reconhecida em suínos, sendo PCV2 e PCV3 os principais agentes etiológicos com impactos econômicos severos na suinocultura mundial. (1) Atualmente, encontra-se disponível uma vacina para prevenção de PCV2, entretanto o aparecimento de PCV3 e sua rápida disseminação sem uma forma de tratamento e/ou prevenção são fatores alarmantes. Esta proposta tem como objetivo a expressão heteróloga das proteínas de capsídeo: PCV1 e PCV3 para geração de partículas semelhantes a vírus (do inglês, *virus-like particle* - VLP). (2) A caracterização estrutural das VLPs será feita por difração de raios-X de monocristais e/ou crio-microscopia eletrônica. As estruturas obtidas serão comparadas com a disponível de PCV2 (número de acesso PDB: 3JCI e 3R0R) e permitirá identificar as diferenças estruturais entre as espécies que causam patogenicidade. (3) Este projeto poderá levar a produção de vacinas específicas para prevenção da infecção por PCV3 ou pluripotentes contra PCV2 e PCV3 e tem o interesse de empresas nacionais, como a Ouro Fino Saúde Animal. Resultados preliminares mostram que obtivemos sucesso na expressão de ambas as proteínas em células de *Escherichia coli* . Protocolos de purificação das mesmas estão sendo estabelecidos.

Referências:

1 PALINSKI, R. *et al.* A novel porcine circovirus distantly related to known circoviruses is associated with porcine dermatitis and nephropathy syndrome and reproductive failure. **Journal of Virology** , v. 91, n. 1, p. e01879-1-e01879-16, Dec. 2016. 2 STADEJEK, T. *et al.* First detection of porcine circovirus type 3 on commercial pig farms in Poland. **Transboundary and Emerging Diseases** , v. 64, n. 5, p. 1350-1353, Oct. 2017. 3 KHAYAT, R. *et al.* The 2.3-angstrom structure of porcine circovirus 2. **Journal of Virology** , v. 85, n. 15, p. 7856-7862, Aug. 2011.

45

IC16

Montagem de uma linha experimental de Espectroscopia de Plasma Induzido por Laser (LIBS) com pulsos de femtossegundos

BONI, L. ; GARCIA, R.
rafaelgarcia@usp.br

A técnica de Espectroscopia de Plasma Induzida por Laser (LIBS) ainda hoje possui muita popularidade e potencial dentro da química analítica. Com análises rápidas, possivelmente remotas e até com a facilidade de ser portabilizada, a técnica é boa para análises em campo, sobretudo porque a amostra geralmente necessita de pouca preparação. (1) Além disso, é uma técnica não destrutiva e não depende de quaisquer reagentes químicos. Realizada com um laser de femtossegundos (fs-LIBS), altas taxas de ablação e densidade de energia potencializam as aplicações da técnica frente aos LIBS mais comuns feitos com nano e picossegundos. (2) Dada a sua importância, o presente projeto de iniciação científica tem como objetivo montar a técnica desde o começo e torná-la funcional. No primeiro semestre, foi possível aprender sobre a instrumentação de um laboratório de fotônica e também se habituar ao uso do laser de femtossegundos, como também programar um espectrômetro usando a plataforma do software LabView, controlando todo o processo de aquisição dos espectros. No segundo semestre focou-se no aprimoramento do sistema de detecção, utilizando novas lentes, adicionando também uma *shutter* para controlar o número de pulsos incidentes na amostra. Resolveu-se o problema da detecção no ultravioleta e foi possível obter sinais com um ruído baixo e linhas de emissão bem definidas, o que permitiu uma clara identificação dos elementos químicos presentes nas amostras.

Referências:

1 MIZIOLEK, A. W.; PALLESCHI, V.; SCHECHTER, I. (eds.) **Laser induced breakdown spectroscopy** . Cambridge: Cambridge University Press, 2006. 2 GUREVICH, E. L.; HERGENRÖDER, R. Femtosecond laser-induced breakdown spectroscopy: physics, applications, and perspectives. **Applied Spectroscopy** , v. 61, n. 10, p. 233A-242A, 2007.

IC17

Alterações bioquímicas de estresse oxidativo no cladócero Daphnia magna por nanopartículas de óxido de cobre e de platina

CHIQUITO, J. G. G. ; ANDRADE, L. S. ; ZUCOLOTTO, V. ; DORNFELD, A. S. M.
joaogabrielchiquito@usp.br

O uso e a produção de nanopartículas de óxido de cobre (NPs CuO) e de platina (NPs Pt) tem aumentado significativamente nos últimos anos, sendo aplicadas em diversas áreas como na indústria, na medicina e na agricultura devido às suas excelentes propriedades de condutividade e catálise. (1) Devido à ampla aplicação destas NPs, é possível que ocorra a liberação em ambientes aquáticos, podendo causar riscos aos organismos aquáticos. Alguns estudos relataram aumento na produção de espécies reativas de oxigênio (ROS) aos organismos expostos às NPs, ocasionando toxicidade, efeitos no sistema antioxidante e danos oxidativos. (2-3) Entretanto, a investigação e compreensão do mecanismo de toxicidade das NPs em cladóceros ainda é limitada, principalmente em relação às NPs de Pt. O objetivo desta pesquisa foi investigar as respostas enzimáticas e danos relacionados ao estresse oxidativo no cladócero *Daphnia magna* exposto às NPs CuO e NPs Pt. Os cladóceros com idade inferior a 24h foram expostos por 48h a concentrações subletais e ecologicamente relevantes das NPs CuO (0,01; 0,02; 0,03 mg Cu L^{-1}) e NPs Pt (0,005; 0,02 e 0,04 mg Pt L^{-1}). Após o período de exposição, foram determinados os níveis de peroxidação lipídica (LPO) e de atividade das enzimas superóxido dismutase (SOD), catalase (CAT), glutationa peroxidase (GPx) e glutationa-S-transferase (GST). Os resultados mostraram que, para as NPs CuO, nas concentrações de 0,02 e 0,03 mg Cu L^{-1}, houve uma indução significativa nas atividades da SOD, CAT, GPx e GST, enquanto que a LPO aumentou somente na concentração de 0,03 mg Cu L^{-1}. Para as NPs Pt, houve aumento da atividade das enzimas CAT, GPx e GST e do nível de LPO apenas na maior concentração testada (0,04 mg Pt L^{-1}). Nas duas maiores concentrações de NPs CuO e somente na maior de NPs Pt, o cládocero produziu mais enzimas antioxidantes de defesa, a fim de proteger contra os danos celulares provocados por agentes oxidativos – como ROS – evidenciando que o estresse oxidativo é um dos principais mecanismos de toxicidade destas NPs. Além disso, na maior concentração de ambas as NPs, a atividade das enzimas antioxidantes não foi suficiente para proteger o organismo, o que provocou danos aos lipídios celulares e, consequentemente, poderá afetar a qualidade e duração de vida do animal. A pesquisa mostrou que, mesmo em concentrações baixas, as NPs podem ser tóxicas à biota aquática, com as NPs CuO apresentando maior potencial danoso que as NPs Pt. Nossos resultados podem fornecem informações que poderão subsidiar ações regulatórias de despejo de nanopartículas.

Referências:

1 NGO, C., VAN DE VOORDE, M. **Nanotechnology in a nutshell** : from simple to complex systems. Paris: Atlantis Press, 2014. 2 ULM, L. *et al.* Response of biochemical biomarkers in the aquatic crustacean Daphnia magna exposed to silver nanoparticles. **Environmental Science and Pollution Research** , v. 22, n. 24, p. 19990-19999, 2015. 3 MWAANGA, P.; CARRAWAY, E. R.; VAN DEN HURK, P. The induction of biochemical changes in *Daphnia magna* by CuO and ZnO nanoparticles. **Aquatic Toxicology** , v. 150, p. 201-209, May 2014. doi: 10.1016/j.aquatox.2014.03.011.

47

IC18

Estudo da combinação de fotobiomodulação e terapia fotodinâmica em células de carcinoma espinocelular oral

COSTA, C. S. ; FARIA, C. M. G. ; BAGNATO, V. S.
camilla.santos.costa@usp.br

O Carcinoma Espinocelular de Cabeça e Pescoço (HNSCC) é o sétimo câncer com maior incidência mundial, com 600 mil novos casos a cada ano. As taxas de sucesso de tratamentos convencionais tendem a permanecer em apenas 40%, devido a grandes índices de reincidência tumoral e metástase. (1) Nesse cenário, destacam-se técnicas não tradicionais de tratamento como a Terapia Fotodinâmica (TFD) e a Fotobiomodulação (PBM), ambas tendo a luz como principal agente. A TFD consiste na ação de um fotossensibilizador (FS) ativado por comprimento de onda específico, tendo como consequência a geração de espécies reativas de oxigênio (EROs) que levam morte celular, principalmente por apoptose. (2) A PBM, por sua vez, se trata de uma técnica com diversas aplicações cujo principal efeito é o aumento da produção de ATP pelas mitocôndrias contribuindo para a oxigenação tecidual. (3) Portanto, nesse projeto é considerada a hipótese de que a PBM contribui para a regressão tumoral por TFD devido ao aumento da concentração de EROs nas células tratadas bem como pelo favorecimento da absorção de fotossensibilizador pelas células tumorais. Neste estudo, células de carcinoma bucal SCC-25 e SCC-4 foram submetidas à TFD precedida de PBM nos comprimentos de onda 660 nm, 780 nm e 0nm (controle). Para a SCC-25 o grupo TFD-PBM 780nm foi o mais eficaz na regressão tumoral, entretanto para a linhagem SCC-4, esse grupo foi o que resultou na maior viabilidade celular, sendo o grupo controle para PBM (TFD-PBM 0nm) o mais eficaz para a erradicação celular. Dessa forma, os próximos passos do estudo visam elucidar as diferenças entre as respostas de cada linhagem frente ao tratamento submetido, a partir de microscopia confocal de fluorescência e de citometria de fluxo, para então obter um entendimento mais vasto da combinação entre a Fotobiomodulação e a Terapia Fotodinâmica.

Referências:

1 U.S. NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE. **Head and neck squamous cell carcinoma** . Disponível em: https://ghr.nlm.nih.gov/condition/head-and-neck-squamous-cell-carcinoma. Acesso em: 15 maio 2019. 2 ROBERTSON, C. A; EVANS, D. H.; ABRAHMSE, H. Photodynamic therapy (PDT): a short review on cellular mechanisms and cancer research applications for PDT. **Journal of Photochemistry and Photobiology B** , v. 96, n. 1, p. 1-8, 2009. 3 PASSARELLA, S.; KARU, T. Absorption of monochromatic and narrow band radiation in the visible and near IR by both mitochondrial and non-mitochondrial photoacceptors results in photobiomodulation. **Journal of Photochemistry and Photobiology B** , v. 140, p. 344-358, 2014. doi: 10.1016/j.jphotobiol.2014.07.021.

48

IC19

Resposta de tumores 3D a Terapia Fotodinâmica avaliada com microespectroscopia Raman

MARQUES, M. J. A. M. ; CAMPOS, C. P. ; IERMAK, I. ; INADA, N. M.
maria.julia.marques@usp.br

A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma técnica muito promissora para o tratamento de lesões pré-cancerosas e cancerígenas, sendo minimamente invasiva. A TFD baseia-se na combinação de três fatores: luz, fotossensibilizador (FS) e oxigênio molecular.(1)O objetivo deste projeto é avaliar os efeitos da terapia fotodinâmica em culturas 3D de células de tumor de mama utilizando a Microespectroscopia Raman. Para a formação de tumores tridimensionais foi utilizado o método de levitação magnética (MLM). Este modelo utiliza nanopartículas magnéticas e um imã para a formação de tumores.(2) Na terapia fotodinâmica, o protocolo foi proposto para não causar a morte completa do tumor, permitindo que um tumor remanescente fosse investigado. O FS Photodithazine (PDZ) foi incubado durante 24 h e foi ativado por uma Biotable, um dispositivo de irradiação personalizado centrado em 660 nm,, entregando a dose de 1 J/cm2.(2) Para analisar os esferóides , foi utilizado o microscópio Raman confocal WITec Alpha 300 RAS. As medições foram feitas antes e em momentos diferentes após a TFD. No grupo controle foi possível identificar diferentes regiões celulares, como o espaço intercelular, onde está localizada a matriz extracelular (MEC), citosol e membrana celular. Diferenças entre os espectros obtidos para os grupos controle e TFD foram identificadas e os perfis destes espectros estão sendo avaliados para identificar o tipo de moléculas contribuintes em cada região. A análise inicial mostra que A TFD causou danos na estrutura do tumor. Proteínas na MEC podem ser o alvo primário da terapia. Com mais análises e novos experimentos será possível entender os mecanismos de ação da TFD em tumores 3D.

Referências:

1 ISSA, M.C.A.; MANELA-AZULAY, M. Terapia fotodinâmica: revisão da literatura e documentação iconográfica. **Anais Brasileiro de Dermatologia** , v.85, n.4,p. 501-11, 2010. 2 HAISLER, W.L. *et al*. Three-dimensional cell culturing by magnetic levitation. **Nature Protocols,** v.8, p.1940–9,2013. doi:http://dx.doi.org/10.1038/nprot.2013.125.

49

IC20

Ensaio antiviral utilizando uma linhagem celular contendo o replicon subgenômico do vírus da febre amarela (Yellow Fever virus - YFV) para a descoberta de fármacos

BATISTA, G. ; FERNANDES, R. S. ; GIL, L. H. V. G. ; OLIVA, G.
gabrielbatista@usp.br

O gênero Flavivirus é composto por mais de 70 vírus de RNA simples fita positivo, com grande impacto na saúde pública em países tropicais. Dentre eles, destaca-se o vírus da febre amarela (Yellow fever virus - YFV), transmitido, em área urbanas, pela picada do mosquito Aedes aegypti. A infecção viral causa sintomas que variam desde febre baixa e náuseas até hemorragia e falência de órgãos. As estratégias de controle vetorial e a vacinação foram cruciais para a diminuição de casos de febre amarela nas últimas décadas. Porém, a utilização da vacina composta pelo vírus atenuado pode induzir efeitos adversos que representam riscos para certos grupos, como pessoas com mais de 60 anos, grávidas e indivíduos imunodepressivos. Além disso, a produção anual de vacinas não supre a demanda de países com alto grau de risco infeccioso. (1) Dessa forma, o desenvolvimento de compostos antivirais apresenta-se como uma importante alternativa para o tratamento da infecção por YFV. A descoberta de drogas antivirais requer ensaios celulares rápidos, confiáveis e que permitam a avaliação de grandes bibliotecas de compostos. O replicon é um sistema sub-genômico auto-replicante no qual os genes que codificam as proteínas estruturais do vírus são substituídos por um gene repórter, como uma luciferase ou uma proteína fluorescente. Os efeitos inibitórios dos compostos na replicação do RNA viral podem ser facilmente avaliados medindo-se a redução dos sinais luminescentes ou fluorescentes. (2-3) O objetivo deste estudo foi utilizar a linhagem de células de mamífero BHK21 (Baby hamster kidney) contendo o sistema replicon do YFV para testar a atividade do composto 001. Primeiro, o sistema foi validado através da detecção da expressão das proteínas do replicon por ensaio de imunohistoquímica indireta e também através da avaliação da replicação do RNA viral pela medida de luminescência da luciferase repórter. Em seguida, foi realizada a curva de dose-resposta para o composto 001 e a concentração efetiva obtida (EC50) foi de 2 μM. O próximo passo será a realização de ensaio de citotoxicidade utilizando a mesma linhagem celular para avaliar a viabilidade desse composto como possível fármaco antiviral.

Referências:

1 PILGER, D. R. B. **Drug repurposing for yellow fever using high content screening** . 2017. doi:10.1101/225656. 2 LI, J.-Q. *et al.* Development of a replicon cell line-based high throughput antiviral assay for screening inhibitors of Zika virus. **Antivirus Research** , v. 150, p. 148-154, Feb. 2018. doi: 10.1016/j.antiviral.2017.12.017. 3 XIE, X. *et al.* Zika virus replicons for drug discovery. **EBioMedicine** , v. 12, p. 156-160, Oct. 2016. doi: 10.1016/j.ebiom.2016.09.013.

50

IC21

Um estudo acerca do ruído térmico em condutores e semicondutores.

MERENDA, J. V. ; CATANANTE, V. A. A. ; BRUNO, O. M.

joao.merenda@usp.br

Condutores elétricos e semicondutores possuem flutuações estatísticas de cargas elétricas devido a agitação térmica. (1) Devido à temperatura, os elétrons livres no condutor realizam um movimento browniano e geram um ruído branco (2), denominado neste caso de ruído térmico. O mesmo é um efeito natural, não sendo necessária a passagem de corrente elétrica pelo condutor para detectá-lo. O ruído pode ser medido pela variação do potencial elétrico entre os terminais do condutor utilizando um amplificador operacional e um osciloscópio ou voltímetro. Por outro lado, o chamado "ruído de corrente" (ou shot noise, em inglês) ocorre devido à passagem de corrente pelo condutor, sendo o ruído total uma superposição entre o ruído térmico, natural do condutor e o ruído causado pela corrente elétrica. Uma das principais aplicações do ruído térmico e do ruído de corrente é a construção de geradores de números aleatórios em hardware (3), dispositivos baratos e de montagem mais simples que os geradores convencionais de números aleatórios em Hardware. Neste trabalho, três componentes eletrônicos foram utilizados para produzir o efeito: resistores, capacitores e transistores. Conjuntos de dados dos ruídos foram mensurados por meio de um osciloscópio e serão analisados por meio de testes de aleatoriedade, para a posterior construção de um sistema gerador de números aleatórios.

Referências:

1 JOHNSON, J. B. Thermal agitation of electricity in conductors. **Physical Review** , v. 32, n. 1, p. 97-109, July 1928. 2 SARPESHKAR, R.; DELBRUCK, T.; MEAD, C. A. White noise in MOS transistors and resistors. **IEEE Circuits and Devices Magazine** , v. 9, n. 6, p. 23-29, Nov. 1993. 3 ZHUN, H.; HONGYI, C. A truly random number generator based on thermal noise. *In*: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ASIC, ASICON, 4., 2001, Shangai. **Proceedings[...]** Beijin: IEEE, 2011. p. 862-864.

IC22

Interferômetro de Mach-Zehnder e a Escolha Retardada Quântica

NAVES, C. B.

caio.naves@usp.br

O interferômetro de Mach – Zehnder é um paradigma para propostas de investigação experimental sobre os fundamentos da teoria quântica porque permite a análise de tópicos avançados como a dualidade onda - partícula, emaranhamento quântico, o "apagador quântico de escolha retardada", entre outros, como proposto por C. Ferrari e B. Braunecker(1) No presente trabalho analisaremos como a dualidade onda - partícula pode ser entendida e atualizada, comparando com o conceito definido por Niels Bohr, através de uma proposta de experimento de escolha retardada quântica feita por R. Ionicioiu e D. R. Terno (2), em que o resultado da determinação da dualidade é obtido através da medição de uma partícula quântica de prova.

Referências:

1 FERRARI, C.; BRAUNECKER, B. Entanglement, which-way measurements, and a quantum erasure. **American Joural of Physics** , v. 78, n. 8, p. 792, 2010. 2 IONICIOIU, R.; TERNO, D. R. Proposal for a quantum delayed-choice experiment. **Physical Review Letters** , v. 107, n. 23, p. 230406-1-230406-5, 2011.

52

IC23
Muonic component of extensive air showers

FIUSA, G. ; SOUZA, V.
gcafiusa@gmail.com

The production of high energy particles in the Universe remains one of the most important mysteries of modern science. The mechanisms of particle acceleration from astrophysical sources are still unknown and recent results suggest that a multi-messenger approach is necessary. Similarly, the detection of the highest energy particles to date shows that models that describe elementary interactions must be revised. The main parameter used to study cosmic ray composition from the shower development perspective is the atmospheric depth in which the shower reaches its maximum development (X_{max}). Some of its features are the agreement between experimental measurements and Monte Carlo simulation data and the possibility of measuring it directly from fluorescence telescopes. Muons are simultaneously the main messengers of the primary particle and of the hadronic interactions taking place in the shower development since they are produced via the charged pion and kaon decay. Recent results (1) suggest a deficit of up to 80% in the muon production in Monte Carlo simulations of ultra-high energy primaries ($> 10^{18}$ eV). Efforts have been made (2) to study the muonic component under the perspective of the Muon Production Depth distribution (MPD) and of the depth in which the muonic production reaches it's maximum (X^{μ}_{max}). Since muons rely directly on the hadronic production, the shape of the MPD contains information about the evolution of the hadronic cascade, likewise, the X^{μ}_{max} parameter relies on properties of hadronic interaction models. Thus, the study of muon related parameters allows us to set constraints on hadronic interaction models as well as to investigate the unsatisfactory description of muon production in extensive air showers. In this work, our efforts were guided towards a new analysis method based on Monte Carlo simulations and solving cascade equations (3) to study the first and the second moments of the MPD, as well as extracting information on the maximum muon production and its related depth in order to study primary cosmic ray composition.

Referências:

1 AAB, A. *et al.* Muons in air showers at the Pierre Auger Observatory: mean number in highly inclined events. **Physical Review D** , v. 91, n. 3, p. 032003-1-032003-12, Feb. 2015. 2 AAB, A. *et al.* Muons in air showers at the Pierre Auger Observatory: measurement of atmospheric production depth. **Physical Review D** , v. 90, n. 1, p. 012012-1-012012-15, July 2014. 3 BERGMANN, T. *et al.* One-dimensional hybrid approach to extensive air shower simulation. **Astroparticle Physics** , v. 26, n. 6, p. 420-432, 2007.

53

IC24

Identificação e caracterização de novos agentes moduladores de microtúbulos com propriedades antitumorais

MARTINS, C. T. ; SILVA, E. M. G. ; MAGALHÃES, L. G. ; B.MASS, E. ; RUSSOSWKY, D. ; ANDRICOPULO, A. D.

carolina.teixeira.martins@usp.br

O câncer é um conjunto de doenças ocasionadas pela proliferação descontrolada de células anormais do organismo.(1) A terapia atualmente disponível, apesar de vasta, apresenta limitações como alta toxicidade e baixa biodisponibilidade.(2) Além disso, há o desenvolvimento de mecanismos de resistência aos fármacos existentes no mercado.(3) Nesse contexto, o desenvolvimento de terapias mais seguras e eficazes se faz necessário. Com o objetivo de identificar e caracterizar novas moléculas com propriedades anticâncer, cujo alvo molecular é a proteína tubulina, três séries de compostos (chalconas; dihidropirimidinonas e híbridos de dihidropirimidinonaschalconas) foram avaliadas em ensaios celulares e bioquímicos empregando a linhagem tumoral MDA-MB-231 e saudável (HFF1). A citotoxicidade dos compostos foi investigada em células tumorais e a capacidade de inibição da migração celular por meio de ensaios qualitativos (wound healing) e quantitativos (câmara de Boyden) foi determinada. Os efeitos dos compostos sobre a organização do citoesqueleto e da cromatina foram investigados por meio de estudos de imunofluorescência. A capacidade dos compostos em modularem a proteína tubulina foi avaliada a partir do ensaio in vitro de polimerização da tubulina e o estudo da progressão do ciclo celular e caracterização dos danos causados pela ação dos compostos foi realizada pela técnica de citometria de fluxo. Inicialmente, uma triagem com 15 representantes das três classes químicas estudadas permitiu a identificação de 12 compostos ativos cujos valores de CC50 (concentração citotóxica em que 50% das células estão inviáveis) variaram entre 3 e 15 μM. Os menores valores de CC50 foram apresentados pelos híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas. Para avaliar a seletividade dos compostos, a citotoxicidade contra uma linhagem não tumoral foi paralelamente estudada.Os híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas mostraram-se mais citotóxicos enquanto as chalconas se mostraram mais seletivas. Ademais, a maioria dos compostos mostraram-se eficientes moduladores da tubulina e capazes de interromper o ciclo celular na fase G2/M. Pretende-se, ainda, avaliar quantitativamente a seletividade dos compostos por meio da determinação de CC50 desses contra a linhagem de células saudáveis HFF1. Os resultados obtidos indicam que as séries estudadas apresentaram hits interessantes para o planejamento e síntese de novos ligantes promissores da proteína alvo.

Referências:

1 INSTITUTO NACIONAL DO CANCER. Disponível em: https://www.inca.gov.br/. Acesso em: 10 jun. 2019. 2 STUURMAN, F. E. *et al.* Oral anticancer drugs: mechanisms of low bioavailability and strategies for improvement. **Clinical Pharmacokinetics** . v. 52, n. 6, p. 399-414, 2013. 3 MANSOORI, B. *et al.* The different mechanisms of cancer drug resistance: a brief review. **Advanced Pharmaceutical Bulletin** , v. 7, n. 3, p. 339-348, 2017.

IC25
Abordagem global de centralidade em redes complexas

MAZZIERO, M. L. ; COMIN, C. H. ; COSTA, L. F.
mateus.mazziero@usp.br

Neste trabalho foram estudadas características topológicas de redes complexas através de medidas de caráter global. Foram usadas as chamadas medidas hierárquicas (1) para dividir a rede em regiões, e assim verificar atributos comuns aos nós de cada região. Essas medidas foram aplicadas a modelos de rede gerados de forma algorítmica(2) (Erdös-Rényi, Waxman e Barabási-Albert) e também a redes reais.(3) Entre os resultados foram observadas a caracterização de centralidade em redes geográficas, e de hubs em redes no modelo de Barabási-Albert.

Referências:

1 COSTA, L. F.; SILVA, F. N. Hierarchical characterization of complex networks. **Journal of Statistical Physics** , v. 125, n. 4, p. 841-872, 2006. 2 ERDÖS, P.; RÉNYI, A. On the evolution of random graphs. **Publication of the Mathematical Institute of the Hungarian Academy of Sciences** , v. 5, n. 1, p. 17-61, 1960. 3 COSTA, L. F. Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks: a survey of applications. **Advances in Physics** , v. 60, n. 3, p. 329-412, 2011.

55

IC26

Desenvolvimento de nanocápsulas de astaxantina para aplicação como agente antioxidante em nanomedicina

ZUCOLOTTO, V. ; ABREU, F. M. O. ; BERNARDI, J. C.
flavia.abreu@usp.br

A astaxantina é um composto hidrofóbico presente em alguns organismos aquáticos, como microalgas e crustáceos, podendo também ser obtido por via sintética. Possui alto valor comercial devido à sua alta capacidade antioxidante e sua utilização na indústria, sendo interessante para aplicação na área médica. (1) Contudo, a molécula livre apresenta instabilidade em ambientes desfavoráveis, baixa solubilidade em água e baixa biodisponibilidade. A busca por métodos de tratamento mais eficientes segue uma tendência crescente e a aplicação da nanotecnologia mostra-se uma opção atraente para minimizar os problemas relativos à utilização da astaxantina (AST), visto que o uso de nanomateriais associados à entrega de diversos medicamentos ou moléculas bioativas tem apresentado resultados satisfatórios quanto à melhora da sua biodistribuição, estabilidade e eficiência. (2) Junto a isso, polímeros derivados do ácido lático são apreciados para esse fim, uma vez que são estáveis e biodegradáveis, não oferecendo riscos à saúde. (3) Frente a essas considerações, este projeto objetiva o encapsulamento da astaxantina em polímero derivado de ácido lático a fim de reduzir as complicações do composto livre, podendo assim ser aplicada como antioxidante em nanomedicina. As nanocápsulas, sintetizadas por nanoprecipitação, foram caracterizadas por espalhamento dinâmico de luz (DLS), potencial zeta e espectroscopia UV-Vis. A eficiência de encapsulamento mostrou-se baixa para as formulações, sendo necessários mais estudos alterando os parâmetros usados a fim de otimizá-la. Também serão realizados espectroscopia vibracional no infravermelho (FTIR), teste de liberação e ensaios para avaliar a eficiência e o nível de toxicidade das nanocápsulas em comparação à molécula livre *in vitro* (para linhagens de fibroblastos saudáveis) e *in vivo* (para o cladócero bioindicador *Daphnia magna*).

Referências:

1 GUERIN, M.; HUNTLEY, M.; OLAIZOLA, M. Haematococcus astaxanthin: applications for human health and nutrition. **Trends In Biotechnology** , v. 21, n. 5, p. 210-216, May 2003. 2 REIS, C. P. *et al.* Nanoencapsulation I. Methods for preparation of drug-loaded polymeric nanoparticles. **Nanomedicine** , v. 2, n. 1, p. 8-21, Mar. 2006. 3 KUMARI, A.; YADAV, S. K.; YADAV, S. C. Biodegradable polymeric nanoparticles based drug delivery systems. **Colloids And Surfaces B** , v. 75, n. 1, p.1-18, Jan. 2010.

56

IC27

Teoria do funcional da densidade aplicada a um ponto quântico acoplado a um fio quântico

FERRARI, A. L. R. F. ; OLIVEIRA, L. N.

ana.luiza.ferrari@usp.br

Estudaremos a condução elétrica (1) através de um dispositivo nanoestruturado elementar: um ponto quântico acoplado a um fio quântico. Trataremos o problema no formalismo da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). O objetivo é calcular a condutância no estado fundamental do dispositivo em função do potencial aplicado ao ponto quântico, que controla a ocupação do orbital que o representa. Procuraremos desenvolver uma aproximação realista para a energia do estado fundamental, como função das densidades; o que significa encontrar uma aproximação para o termo de troca e correlação que vai além da aproximação de Hartree, que o trata como se fosse nulo. O resultado será comparado com dados teóricos obtidos com o método do grupo de renormalização numérico (NRG).

Referências:

1 SERIDONIO, A. C.; YOSHIDA, M.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance through a quantum wire side-coupled to a quantum dot. **Physical Review B** , v. 80, n. 23, p. 235318-1-235318-13, Dec. 2009.

57

IC28

Utilização de ventoinhas em circuitos elétricos: uma proposta de substituição para as lâmpadas incandescentes

DAMACENO, L. C. G. ; CATUNDA, T. ; COSTA, G. G. G.
lesley.damaceno@usp.br

A importância das demonstrações investigativas no estudo de circuitos elétricos ressalta que os conhecimentos prévios dos estudantes afetam significativamente o que eles podem aprender. Nesse sentido, o ensino de ciências mostra-se mais efetivo quando os conceitos desenvolvidos se baseiam em experiências concretas. (1) A proposta de utilização de experimentos qualitativos em circuitos simples, usando o brilho de lâmpadas incandescentes como indicador da corrente elétrica em um ponto do circuito, são fundamentados em Demonstrações Investigativas (DI). Entretanto todas as lâmpadas incandescentes estão desaparecendo do mercado, pois estão sendo substituídas por LEDs em quase todas as suas aplicações. Isso impossibilitará o uso das lâmpadas incandescentes como um recurso didático no estudo de circuitos elétricos. Dado esse contexto e as novas pesquisas na área (2-3), o trabalho busca explorar a possibilidade de substituir as lâmpadas incandescentes, que são utilizadas em demonstrações investigativas de circuitos elétricos, por pequenas ventoinhas usadas normalmente na refrigeração de computadores e componentes eletrônicos. Nessa nova situação, a rotação das ventoinhas foi um indicativo da corrente elétrica em um ponto do circuito. Foram realizados experimentos através da montagem de circuitos elétricos com as ventoinhas, e foi possível encontrar ventoinhas que obedecem à Lei de Ohm. O uso desse novo componente em circuitos pode ser uma boa alternativa às lâmpadas incandescentes, pois permite um aprendizado multissensorial, uma vez que o estudante poderá observar a rotação das pás giratórias, ouvir o ruído do ventilador e sentir, através do tato, a vibração da ventoinha. Tal resultado pode abrir espaço para novos estudos sobre estratégias de ensino-aprendizagem para alunos com deficiência visual. Essa proposta de mudança e inclusão no ensino de física vão ao encontro das bases do ensino investigativo e aprendizagem ativa, preconizados na Base Nacional Comum Curricular.

Referências:

1 MCDERMOTT, L. C. Millikan Lecture 1990: what we teach and what is learned - closing the gap. **American Journal of Physics** , v. 59, n. 4, p. 301-315, Apr. 1991. 2 EKEY, R. *et al.* A fan-tastic alternative to bulbs: learning circuits with fans. **The Physics Teacher** , v. 55, n. 1, p. 13-15, Jan. 2017. 3 MITCHELL, B. *et al.* A fan-tastic quantitative exploration of Ohm's law. **The Physics Teacher** , v. 56, n. 2, p. 75-78, Feb. 2018.

IC29

Study of curcumin formulations for the treatment of infectious diseases by Photodynamic Therapy

SILVA, K. O. O. ; BLANCO, K. C. ; SOARES, J.
karolinyoliveira@usp.br

O amplo uso de medicamentos antibióticos para o tratamento de doenças infecciosas, mais especificamente as causadas por bactérias, contribui para a resistência desses microrganismos aos compostos já conhecidos, e somando esse efeito ao fato de que o número de novos antibióticos produzidos só decresce nos últimos anos, nos revela um cenário em que a necessidade de novos meios de combate à microrganismos é urgente.(1)Com esse objetivo, surgiu a ideia de usar a Terapia Fotodinâmica antimicrobiana (TFDA) para tratar faringotonsilites, infecções do trato respiratório superior. Essa terapia consiste em usar um fotossensibilizador, no caso a Curcumina, que quando irradiado por luz no comprimento de onda adequado, em torno de 450 nm, é capaz de gerar espécies reativas de Oxigênio. Essas moléculas excitadas, por sua vez, reagem com compostos orgânicos das bactérias, desestruturando elementos fundamentais que compõem suas células.(2)Esse estudo busca indicar a melhor formulação de Curcumina para o tratamento das Faringotonsilites causadas por *Streptococcus pyogenes* , em solução de base de Xarope (30% de Glicose e 70% de Água) com concentração de 2,25 mg/mL. E para isso foram feitos ensaios in vitro da TFDA, utilizando a Biotable® para fornecer a dose de luz de $60\ J/cm^2$ em amostras de Curcumina Natural e Sintética, ambas produzidas pela Sigma-Aldrich®.(3) Os dados foram coletados para 4 tempos de incubação da bactéria em solução com curcumina distintos (tempo total de 16 min e amostras coletadas em tempos igualmente espaçados), e verificou-se que a sintética apresentou redução média de 1,25 Log(UFC/mL), e a natural obteve uma variação média de 3 Log(UFC/mL). Analisou-se também a incorporação desses compostos e a curcumina sintética foi mais bem incorporada, com um valor médio de 45% de incorporação, enquanto que a curcumina natural, possui valores em torno de 35% do total de FS incorporado. Mesmo com uma menor incorporação, o melhor desempenho da Curcumina Natural na TFDA sugere que ela é a melhor opção para o tratamento, dentre as formulações analisadas.

Referências:

1 SPELBERG, B. *et al.* The epidemic of antibiotic-resistant infections: a call to action for the medical communityfrom the infectious diseases society of america. **Clinical Infectious Diseases,** v. 46, n.2, p.155–164, 2008. 2 HAMBLIN, M. R.; HASAN, T. Photodynamic therapy: a new antimicrobial approach to infectious disease? **Photochemical Photobiological Sciences,** v.3, n.5, p.436-450,2004. 3 BLANCO, K. C.; INADA, N. M.; CARBINATTO, F. M.; BAGNATO, V. S. Antimicrobial efficacy of curcumin formulationsby photodynamic therapy. **Journal of Pharmacy and Pharmacology,** v. 5, p.506–511, 2017.

IC30

Determinação de espectros de refração não linear de soluções de corantes pelas medidas de rotação não linear da polarização elíptica

MISOGUTI, L. ; MOYSÉS, R.

renatomaframoyses@usp.br

A fotônica tem grande importância para o desenvolvimento de novas e mais eficientes tecnologias, principalmente na área de comunicação, como em processamento de dados e em transmissão de informações. Neste sentido, há uma intensa pesquisa em novos materiais, na qual é extremamente importante ter conhecimento sobre suas características ópticas lineares e não lineares. Nesse projeto, nosso enfoque é a determinação do espectro de refração não linear, n_2. Especificamente medir o espectro de n_2 de soluções de corantes pelas medidas de rotação não linear da polarização elíptica (RNLPE).(1) Foram analisadas duas soluções de corantes (DR1 e DR13), pois já havia sido estudado o espectro de absorção não linear de ambas. Também foi levado em conta a mudança no n_2 da solução devido a variação da largura do pulso.(2) De maneira geral, os resultados foram satisfatórios, pois foi possível a determinação do espectro de n_2 das soluções, as quais se mostraram interessantes por possuírem diferentes comportamentos conforme o comprimento de onda é variado. Ademais, levando-se em conta o valor da refração não linear do solvente (metanol)(3) para diferentes comprimentos de onda, foi possível determinar o espectro de n_2 puro dos solutos. Grosso modo, o DR13 tem a propriedade de aumentar o n_2 para comprimentos de onda entre λ = 1100 nm e λ = 1300 nm e também em intervalos de 700 a 750 nm, e diminuir para comprimentos de onda entre λ = 600 nm e aproximadamente λ = 700 nm. Por volta dos 800 nm até 1100 nm a contribuição do corante é praticamente nula. Já o DR1, aumenta o n_2 para comprimentos de onda aproximadamente entre 1000 e 1300 nm e diminui para valores entre 600 e 700 nm. Na região de λ = 700 e λ = 1000 nm o soluto não influencia o n_2 da solução. Chegamos a conclusão de que a técnica da RNLPE está sendo extremamente eficiente para a caracterização de soluções e com isso, futuramente, poderá ser estendida para outros diferentes corantes em diferentes solventes.

Referências:

1 MIGUEZ,M. L. *et al.*Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick samples. **Applied Physics B,** v.10, p.653-658, 2015. doi: 10.1007/s00340-015-6178-x. 2 MIGUEZ, M. L. *et al.* Measurement of third-order nonlinearities in selected solvents as a function of the pulsewidth. **Optics Express,** v.25, p.313-319,2017. doi: 10.1364/OE.25.003553. 3 MELHADO, M.S. *et al.* Absolute nonlinear refractive index spectra determination of organic molecules in solutions. **Journal Physical Chemistry A,** v.123, n.4, p.951-957,2019. doi: 10.1021/acs.jpca.8b10984.

IC31

Estudo de um modelo efetivo de spin por meio de simulações de Monte Carlo.

ANDRADE, E. C. ; MARTINS, W.

wilson.santana.martins@usp.br

Nesse projeto, propomos estudar um modelo efetivo de spins por meio de simulações de Monte Carlo (1) clássicas. Especificamente, estudaremos um modelo de spins planares, ou XY, em três dimensões acrescido de um termo de anisotropia Z6 dependente da temperatura. (2) Investigamos como essa anisotropia seleciona diferentes subconjuntos de estados ordenados e qual é a natureza da transição entre esses estados. O sistema físico original que temos em mente são os pirocloros XY inomogêneos, que são materiais magnéticos intensamente estudados atualmente nos quais a física de sistemas magnéticos frustrados e desordenados se encontram dando origem a uma gama rica de fenômenos e fases.

Referências:

1 LANDAU, D. P.; BINDER, K. **A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics** . 4th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2015. 2 LOU, J.; SANDVIK, A. W.; BALENTS, L. Emergence of U(1) symmetry in the 3D XY model with Zq anisotropy. **Physical Review Letters** , v. 99, n. 20, p. 207203-1-207203-4, Nov. 2007.

IC32

Desenvolvimento de sistema de visão computacional para reconhecimento de trincas e rachaduras em processo de controle de malha fechada aplicado à procedimentos de deposição de materiais metálicos a laser

KÜHL, K. ; CASTRO NETO, J. C. ; YASUOKA, F. M. M.
kevin_kuhl@usp.br

O presente projeto propôs o desenvolvimento de um sistema de visão computa- cional capaz de reconhecer trincas e rachaduras em superfícies metálicas, realizando etapas de pré-processamento e análise de imagem.(1) Tal abordagem torna-se relevante, uma vez que tratamentos de superfícies metálicas constituem uma etapa ou processo de grande interesse para diversos ramos da indústria com o intuito de prevenir desgastes ou reparar superfícies danificadas, principalmente de componentes mecânicos de alto valor agregado, geralmente designados para operarem em condições extremas de trabalho e/ou atenderem requisitos de segurança imprescindíveis. Métodos tradicionais para realizar tais procedimentos normalmente são custosos e possuem desvantagens significativas.(2) Desse modo, o projeto surgiu com o intuito de reduzir as desvantagens do processo com parâmetros pré-estabelecidos, incluindo o ferramental proporcionado pela visão computacional em um projeto de deposição a laser utilizando controle de malha fechada, possibilitando, assim, correções em tempo real.(3)

Referências:

1 TOYSERKANI, E.; KHAJEPOUR, A.; CORBIN, S. **Laser cladding.** Boca Raton:; CRC Press LLC, 2000. 2 PULLI, K. *et al.* Real-time coputer vision with openCV. **Comunications of the ACM,** v.55,n.6, p.61-69, 2012. 3 BRADSKI, G. R.; KAEHLER, A. **Learning openCV** : computer vision with the OpenCV library. Sebastopol, CA: O'Reilly, 2008.

62

IC33
Modelo simples de cordas cósmicas

GREGORIO, G. ; HARTMANN, B.
gustavo.gregorio@usp.br

Diferente do que muitos podem pensar e do que o nome da a entender, as cordas cósmicas diferem em partes das famosas cordas fundamentais da teoria das cordas, estando no extremo oposto quando se trata de ordem de grandeza, que no caso das cordas cósmicas pode atingir a ordem de galáxias. O nome se dá pelo fato de tratar-se de estruturas extremamente finas, com espessura da ordem atômica mas com o comprimento da ordem de anos-luz. Essas conhecidas como "rachaduras no universo"fazem parte da teoria de campos, que supõe que todo o universo é permeado por campos como se fossem uma espécie de "líquido"e que nossas partículas são ondulações desses campos. Logo após o big bang houve um subto resfriamento desse "líquido"que resultou em uma transição de fase nesses campos. Como o universo não era simplesmente conexo o "congelamento"dele ocorreu em diferentes orientações, similar ao que acontece com a água quando torna-se gelo. As cordas cósmicas seriam as rachaduras que se formam no gelo, linhas onde essas orientações distintas se encontram. O projeto almeja explica sucintamente o modelo mais simples de campo que explica cordas cósmicas. Utilizando de um potencial de campo escalar e uma quebra espontânea de simetria, e explicando o por que com essa quebra espontânea e o conceito de comprimento de correlação do novo campo, pós transição de fase, é possível que haja o surgimento de defeitos topológicos conhecidos como cordas cósmicas. (1)

Referências:

1 UNIVERSITY OF CAMBRIDGE. Department of Applied Physics and Theoretical Physics. **Cosmic strings ans other topological defects** . Disponível em: http://www.damtp.cam.ac.uk/research/gr/public/cs_top.html. Acesso em: 10 jun. 2019.

63

IC34
Verifying the Wiedemann-Franz law for conjugated polymers

GODOY, R. S. ; ZANUTO, V. S. ; FARIA, G. C.
richard.godoy@usp.br

Every day humanity uses more than a million Terajoules of energy, mostly from fossil fuels. Needless to say that the usage of fossil fuels has been linked to the rising levels of greenhouse gases in the Earth's atmosphere and is one of the leading contributors to climate warming. This scenario must change. For years a crucial technology that is an important candidate to join the team of renewable and green solutions was out of the spotlight. This is the Seebeck Generator or, simply, Thermoelectrical Generator. Such a generator relies on the difference of temperature to generate electrical current. Basically, a temperature gradient throughout the material results in heat flow, causing the diffusion of charge carriers from the hotter to the cooler zone. Most of the materials currently applied as a thermoelectric platform are based on metals alloys as well as inorganic semiconductors, such as bismuth telluride. However, recently conjugated polymers have also joined the pallet of available materials for thermoelectric applications, especially due to the possibility of an easy-to-manufacture flexible thermoelectric generator. In metals and most inorganic semiconductors, there is a relation between the thermal conductivity () and the electrical conductivity (), known as the Wiedemann-Franz law.(1)This relation states that the ratio between the thermal and the electric conductivities is proportional to the temperature, with the constant of proportionality being independent of the system. The main question that arises here is: what is the correlation between the electronic and thermal conductivity in a conjugated polymer? In this research project, we intend to study the validity of the Wiedemann-Franz Law for conjugated polymers. The most commonly used and developed p-type material for thermoelectric applications is PEDOT:PSS and its derivatives, which will be used as our prototype materials. For the thermal conductivity measurements, Thermal Mirror technique (TM) will be performed.(2) TM is a pump and probe method which considers the laser induced surface deformation. The amplitude of the deformation is directly related to the optical absorption and the linear thermal expansion coefficients, and the time evolution of the deformation depends on the heat diffusion properties. The technique is a nondestructive, remote and high-sensitive photothermal method, capable of measuring thermal properties such as thermal expansion and thermal conductivity. For the measurements of electrical conductivity, we plan on using the well-established four-probe measurement.(3) The method requires equally spaced four probes, which are placed in contact with the material to be analyzed. A current source is connected between the two outer probes and a current is applied to them. This process will generate a voltage difference between the two inner probes. Knowing the applied current, the difference of potential between the inner probes and the distance between probes, it is possible to calculate the resistivity/conductivity of the material. Knowing and for PEDOT:PSS, we will study the validation of the Wiedemann-Franz Law.

Referências:

1 FRANZ, R.; IEDEMANN, G. Ueber die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle. **Annalen der Physik,** v.89, n.8,1853. doi:10.1002/andp.18531650802. 2 ZANUTO, V. S. *et al.* Thermal mirror spectrometry: an experimental investigation of optical glasses. **Optical Materials,** v.35,n.5, p.1129-1133,2013. doi:10.1016/j.optmat.2013.01.003. 3 GIROTTO, E. M; SANTOS, I. A. Medidas de resistividade elétrica DC em sólidos: como efetuá-las corretamente. **Quimica Nova,** v.25, n.4, p.639-647,2002. doi:10.1590/S0100-40422002000400019.

IC35

Introdução à Física dos Buracos Negros e a Algumas Soluções da Relatividade Geral

RAIA NETO, M. ; BOTTI, L. C. L.

mraianeto@gmail.com

Do ponto de vista da Teoria da Relatividade Geral (TRG), o movimento de um corpo na presença de um campo gravitacional legítimo advém então da curvatura do espaço-tempo (isto é, da curvatura de uma variedade de Lorentz, (M, g), quadri-dimensional, onde M é a variedade diferenciável e g é o tensor métrico que define uma geometria nesta variedade). As equações dinâmicas que definem o movimento de um corpo na presença de um campo gravitacional (isto é, em um espaço-tempo curvo) gerado por uma distribuição de matéria e energia, são dadas então pelas Equações de Einstein. As soluções das Equações de Einstein são então expressas pelo tensor g, sendo assim possível então definir geometrias convenientes e então procurar qual seriam as distribuições de matéria e energia que poderiam causar tal geometria no espaço-tempo. O presente projeto estudou algumas soluções da Equações de Einstein: as soluções que Schwarzschild, Kerr, Reissner-Nordström e Kerr-Newman (1), e duas outras soluções -ditas exóticas- chamadas de Wormhole (2) e Warpdrive. (3) As soluções de Schwarzschild, Kerr, Reissner-Nordström e Kerr-Newman definem então, respectivamente, um espaço-tempo que modela corpos esféricos sem carga e sem rotação, um espaço-tempo que modela corpos com simetria axial, com rotação e sem carga,um espaço-tempo que modela corpos esféricos, sem rotação e com cargas elétrica e magnética e, por fim, um espaço-tempo que modela corpos com simetria axial,com rotação e com cargas elétrica e magnética. Sob alguns limites dentro das soluções, tais geometrias levam ao conceito de Buraco Negro. Sobre a física de buracos negros o presente trabalho estudou então o movimento de geodésicas (trajetórias) de partículas massivas e não massivas nos espaços-tempos citados acima, bem como a estrutura causal (isto é, as propriedades globais do espaço-tempo) de cada um deles. Com respeito às soluções exóticas, a solução (ou classe de soluções) de um "Wormhole" permite uma noção de "ponte" entre duas regiões muito afastadas distintas de um espaço-tempo. Já a solução do "Warpdrive" infere uma geometria que infere uma noção de "viagem super-luminal". O mérito de tais soluções, do ponto de vista do presente projeto, reside então no estudo das chamadas condições de energia. Tais condições, basicamente, são impostas às Equações de Einstein, para definir a viabilidade física de um espaço-tempo; tais condições então dizem respeito ao tipo de distribuição de energia e matéria que são razoáveis fisicamente. As soluções de "Wormhole" e "Warpdrive" em geral levam a condições de energia fisicamente não aceitáveis.

Referências:

1 FROLOV, V. P.; ZELNIKOV, A. **Introduction to black hole Physics** . 2nd ed. New York: Oxford University Press, 2017. 2 MORRIS, M. S.; THORNE, K. S. Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: a tool for teaching general relativlty. **American Journal of Physics** , v. 56, n. 5, p. 395-412, May 1988. 3 ALCUBIERRE, M. The warp drive: hyper-fast travel within general relativity. **Classical and Quantum Gravity** , v. 11, n. 5, p. L73-L77, 1994.

IC36

Síntese e caracterização de nanotubos de hematita produzidos em aço carbono para fotossíntese artificial.

RABELO, L. ; LUCAS, T. A. ; VITALINO, R.
lucasgr_17@usp.br

Óxido de ferro (ou hematita) é um material semicondutor promissor para a fotossíntese artificial.(1)Com o intuito de melhorar a eficiência desse processo, nanoestruturas têm sido desenvolvidas e aplicadas; entre elas, os nanotubos destacam-se como os mais eficientes.(2) Neste trabalho, sintetizaram-se nanotubos de óxido de ferro através da anodização de aço carbono. Além do menor custo em comparação com o ferro ultrapuro (substrato normalmente utilizado nessa síntese), os materiais minoritários presentes na estrutura de aço carbono podem ser abordados como dopantes. Estudaram-se sistematicamente os parâmetros ideais para garantir a formação de nanotubos e a reprodutibilidade do processo. Uma vez anodizada, as amostras foram tratadas termicamente a 380 °C. Através da caracterização realizada por difração de raios-X e espectroscopia Raman, confirmaram-se a cristalização e presença majoritária de óxido de ferro no filme óxido. O potencial dos nanotubos em absorver na radiação ultravioleta e visível também foi abordado. Entretanto, os testes foto eletroquímicos (PEC) revelam uma densidade de fotocorrente muito baixa em comparação com trabalhos similares reportados na literatura, tornando o material inadequado para aplicações na fotossíntese artificial.(3) A morfologia dos nanotubos evidenciada pela microscopia eletrônica de varredura justifica esse comportamento, corroborando com a possível influência negativa dos dopantes da estrutura do aço carbono na geração de fotocorrente.
[1]: http://CodeCogsEqn.gif

Referências:

1 SIVULA, K.; LE FORMAL, F.; GRÄTZEL, M. Solar water splitting: progress using hematite (α[U+2010]Fe2O3) photoelectrodes. **ChemSusChem** v. 4, n. 4, p. 432-449, 2011. 2 KMENT, S. *et al.* Photoanodes based on TiO 2 and α-Fe 2 O 3 for solar water splitting–superior role of 1D anoarchitectures and of combined heterostructures. **Chemical Society Reviews** , v. 46, n. 12, p. 3716-3769, 2017. 3 DENG, H. *et al.* Iron oxide nanotube film formed on carbon steel for photoelectrochemical water splitting: effect of annealing temperature. **Surface and Interface Analysis** , v. 48, n. 12, p. 1278-1284, 2016.

66

IC37

Composição de mapas caóticos usando deep-zoom para aprimoramento de PRNG

ALVARENGA, J. P. V. ; BRUNO, O.
j.p.valle@df.ufscar.br

A teoria do caos têm recebido um crescente interesse nas mais diversas áreas do conhecimento. Recentemente um estudo introduziu a abordagem chamada deep-zoom (1), por meio da qual é possível observar a mudança da dinâmica caótica do sistema tornando-o mais caótico e suas órbitas com propriedades mais apropriadas para geradores de números pseudos-aleatórios (PRNG). Neste projeto estudou a composição de dois mapas caóticos: mapa de tenda e mapa logístico usando abordagem do deep-zoom, por meio de ferramentas computacionais e métodos de visualização conhecidos na literatura, tais como: diagrama de espaço-fase, diagramas de cobweb, diagrama de bifurcação, expoente de Lyapunov, diagrama de Poincaré e histograma. Onde encontrou propriedades caóticas interessantes, como um alto valor para o expoente de Lyapunov e um amplo intervalo para parâmetros que trazem vantagens para a pseudo-aleatoriedade e que levam a randomização dos mapas estudados. Além disso, o trabalho desenvolvido também foi aplicado aos geradores de números pseudo-aleatórios (PRNG), já que a partir da composição de mapas caóticos obtém hiper-caos o que permiti ser uma fonte de números pseudoaleatórios mais confiável. Ademais, realizou uma bateria de testes estatísticos de aleatoriedade (2-3) nos mapas caóticos e em sua composição, no qual o mapa da composição obteve melhores resultados em relação ao mapa logístico e mapa de tenda sem a composição, indicando uma melhora dos resultados encontrados com respeito ao estudo que introduziu deep-zoom, portanto, por meio da composição de mapas caóticos é possível alcançar propriedades mais aprimoradas para geradores de números pseudos-aleatórios (PRNG).

Referências:

1 MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Improving the pseudo-randomness properties of chaotic maps using deep-zoom. **Journal of Nonlinear Science** , v. 27, n. 5, p. 053116-1-053116-14, 2017. 2 RUKHIN, A. *et al.* **A statistical test suite for random number generator for criptographic applications** . Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2010. 131 p. 3 MARSAGLIA, G. **The Marsaglia random number CDROM, with the DIEHARD battery of tests of randomness** . Florida: Florida State University,1995.

67

IC38
Reconhecimento molecular entre septinas

GRANATO, J. E. ; GARRATT, R. C.
joao.granato@usp.br

As septinas são proteínas GTPases que se polimerizam em heterofilamentos e que controlam diversos processos celulares. Em humanos, o domínio G central, ligante de GTP, de uma septina do grupo SEPT2 pode interagir com o domínio G de uma septina do grupo SEPT6 através da chamada interface G. (1) De acordo com o protocolo conhecido como "regra de Kinoshita", os filamentos de septinas de mamíferos poderiam ser compostos a partir da combinação de 4 septinas: SEPT2, SEPT6, SEPT7 e um membro do grupo SEPT3, podendo ser substituídas por uma outra septina do mesmo grupo. (2) Assim, para se verificar a possibilidade de se obter um heterodímero estável e para compreender e caracterizar estruturalmente e bioquimicamente a interação da interface G entre septinas dos grupos SEPT2 e SEPT6, o complexo SEPT2-SEPT8 foi co-expresso e, então, purificado por IMAC e SEC. A confirmação do estado oligomérico foi obtida por SEC-MALS, na qual observou-se um pico cuja massa molecular era de 64 kDa (massa teórica do dímero 65 kDa), além de um segundo pico muito pequeno de 34 kDa. A curva de desnaturação térmica obtida indicou que a temperatura de melting (Tm) para o dímero seria de 53,3 °C. Também foram realizados ensaios de cristalização para o heterodímero, os quais foram bem-sucedidos em condições bem diversas de cristalização, sendo ainda observadas formas cristalinas variadas. Portanto, foi possível obter uma amostra bem homogênea do heterodímero para fins práticos, além de boas condições para a reprodutibilidade dos ensaios de cristalização para estudos posteriores.

Referências:

1 VALADARES, N. F. *et al*. Septin structure and filament assembly. **Biophysical Reviews** , v. 9, n. 5, p. 481-500, 2017. 2 KINOSHITA, M. Assembly of mammalian septins. **Journal of Biochemistry** , v. 134, n. 4, p. 491-496, 2003.

68

IC39

Qualitative analysis of global dynamics in predator-prey systems

MOURA, R.

rfomoura@usp.br

The classical Lotka-Volterra equations are used to describe the dynamics of two species that interact in an ecosystem as predator and prey. Let the population of these species be denoted by y and x, respectively, so the model has the form:
$\dot{x} = x(\alpha - \beta y)$
$\dot{y} = y(-\gamma + \delta x)$
With all coefficients being positive constants.Several generalizations of these equations are used to study the evolution of species population in ecosystems: more species can be considered, each one affecting the others; the functional response of predator to preys, defined as the predation rate divided by number of predators – in classical model it is βx – can be a more complex function of the food density, and factors as changes in the environment or delays related to gestation time can be included.In nature, one can see that the overall interaction of species in the ecosystem often leads to stable dynamics, where populations oscillate or remain practically constant. Human beings may also induce systems to guarantee that one specie will not vanish from the environment, or become destructively numerous. Mathematical ecology hence requires the study of the conditions in which the ecological dynamical models are robust, i.e., small perturbations in the systems do not shift drastically its long-time behavior.In this work I show the results obtained by Tian, X *et al* and Forde, J.E. in the application of qualitative ordinary differential equations' theory to study the global dynamics of a Lotka-Volterra equation with Holling II functional response, presented in (1) and a predator-prey model with delay due to predator gestation (2), focusing in finding the conditions that guarantee limit cycles or stable equilibrium points, and the regions where stability holds.

Referências:

1 TIAN, X *et al*. Global dynamics of a predator-prey system with Holling type II functional response. **Nonlinear analysis:** modeling and control, v.16, n.2, p.242-253, 2011. 2 FORDE, J.E. **Delay differential equation models in mathematical biology** 2005.104p. Dissertation (Doctor of Philosophy) - The University of Michigan, Michigan, 2005.

IC40

Critical behavior of an ultracold, non-uniform Bose gas: a computational study

MIOTTI, M. ; HEMMERLING, M. ; BAGNATO, V.

marcos.miotti@usp.br

Research on critical phenomena is a current trend in Physics, due especially to its multidisciplinary character. A classical example of critical phenomenon is the Bose-Einstein condensation (BEC), which can observed in dilute gases below microkelvin temperatures. (1) In those experiments, the gas samples are usually trapped in harmonic potentials. Though technically simple, that confinement makes the density of the samples inhomogeneous, thus the standard analysis of criticality does not hold. Nonetheless, the global-variable method (2) allows us to identify a pair of canonical variables in a harmonical system that are equivalent to pressure and volume in a uniform system. Therefore, a harmonical system can be treated as *uniform* in the global-variable picture. For that reason, we used that approach to study theoretically the thermodynamic properties of a harmonically confined rubidum-87 gas around its BEC temperature. Those properties have been determine by self-consistent calculations using the Hartree-Fock approximation in the Thomas-Fermi limit, which describes corretly the thermodynamic properties of 10^4 10^6-atom systems. (3) Those results will support our ongoing experimental study and they will be presented during the SIFSC 2019.

Referências:

1 KETTERLE, W.; DURFEE, D.S.; STAMPER-KUN, D. M. Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates. *In*: INTERNATIONAL SCHOOL OF PHYSICS "ENRICO FERMI", 1998, Varenna. **Proceedings[...]**. Amsterdam: IOS. v. 140, p. 67-176, 1999. 2 ROMERO-ROCHÍN, V. Equation of state of an interacting bose gas confined by a harmonic trap: the role of the "harmonic" pressure. **Physical Review Letters** , v. 94, n. 13, p. 130601-1-130601-4, Apr. 2005. 3 GERBIER, F. *et al*. Experimental study of the thermodynamics of an interacting trapped Bose-Einstein condensed gas. **Physical Review A** , v. 70, n. 1, p. 013607-1-013607-10, July 2004.

70

IC41

Thermal properties of the Rubidium-87 gas in a harmonic potential around its Bose-Einstein temperature

MACHADO, L. A. ; MIOTTI, M. P. ; HEMMERLING, M. ; TELLES, G. D. ; BAGNATO, V. S.
lemachado@usp.br

It has always been a great interest of physics to explain the macroscopic world from the understanding of its microscopic constituents. (1) The first success was studying the behavior of a gas in the Bose-Einstein condensation (BEC), because in this regime, the quantum nature of matter manifests itself macroscopically. (1) In the BEC for a gas, the wave-like behavior shows up typically microkelvin temperatures. (2-3) In most experiments, that condition is usually achieved with samples confined inharmonic potentials. That technique is well known and used worldwide by many research groups. (3) However, the BEC in those systems still lacks a definite description, since their densities are inhomogeneous and the thermodynamic properties do not hold. Hence, it is still an open problem in Physics. In this undergraduate project, we study the thermal properties around the Bose-Einstein critical temperature (T_c) by analyzing experimental data of rubidium-87 gas confined into a harmonic potential. By investigating the atomic density of the samples, we expect to see an abrupt change in density at $T = T_c$, evidencing the BEC. The properties of that phase transition will be discussed during the SIFSC 2019.

Referências:

1 BAGNATO, V. S. A condensação de Bose-Einstein. **Revista Brasileira de Ensino de Física** , v. 19, n. 1, p. 11-26, mar. 1997. 2 KETTERLE, W.; DURFEE, D. S.; STAMPER-KURN, D. M. Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates. In: INTERNATION SCHOOL OF PHYSICS "ENRICO FERMI", 1999, Varenna. **Proceedings[...]** Amsterdam: IOP, 1999. v. 140. p. 67-176. 3 BAGNATO, V. S. *et al.* Bose-Einstein condensation: twenty years after. **Romanian Reports in Physics** , v. 67, n. 1, p. 5-50, 2015.

71

IC42

Aferição de parâmetros oculares a partir do princípio de Scheimpflug

LAISSENER, B. S. ; CASTRO NETO, J. C. ; OLIVEIRA, A. O.

sartolaissener2@gmail.com

O projeto está inserido no contexto de instrumentação óptica voltada à oftalmologia, mais especificamente na área de aferição de parâmetros oculares inerentes à cirurgia de tratamento da catarata. Tal doença é responsável por cerca de 47,8% dos casos de cegueira mundial (1) e pode ser caracterizada pela opacificação do cristalino devido a modificações fisiológicas com efeitos desde pequenas alterações visuais até a cegueira. (2) A partir disso, o objetivo principal de nosso projeto, é o desenvolvimento de um protótipo que consiga aferir grandezas geométricas como a curvatura da córnea, comprimento axial ocular, distância entre a córnea e o cristalino e espessura do cristalino. Na etapa vigente do projeto, o trabalho foi voltado à medida da espessura do cristalino e a distância entre a córnea e o cristalino utilizando um método não invasivo baseado no princípio de Scheimpflug. Esse princípio consiste na captação da imagem formada por um objeto cujo plano imageado não é paralelo ao plano da lente. A partir da rotação do plano da imagem, é possível estabelecer um ângulo especifico entre o plano do objeto e o da imagem, chamado ângulo de Scheimpflug que, ponderado pelo sistema óptico, permite o foco completo do objeto observado. O sistema desenvolvido é constituído de uma iluminação na forma de fenda, na região azul do espectro visível, para o estabelecimento do plano imageado do cristalino e um sistema óptico baseado no princípio descrito acima que desenvolve o papel de magnificação e captação da imagem referente ao plano transversal ocular que contém os parâmetros desejados. Fomos capazes de desenvolver e implementar o sistema com resultados satisfatórios comparáveis aos dos equipamentos comerciais de alto nível utilizando materiais voltados para prototipagem genérica com custo reduzido. Esse trabalho apresenta grande relevância relacionada à nacionalização da tecnologia que, até então, não é dominada por nenhuma empresa nacional.

Referências:

1 RESNIKOFF, S. *et al.* Global data on visual impairment in the year. **Bulletin of the World Health Organization** , v. 82, n. 11, p. 844-851, Nov. 2004. 2 ALLEN, D.; VASAVADA, A. Cataract and surgery for cataract. **British Medical Journal** , v. 333. n. 7559, p. 128-132, July 2006.

72

IC43

Implementação de uma criptografia de stream baseada na equação do K-mapa logístico

LARSEN, B.

bruno.larsen@usp.br

O objetivo principal desse projeto de iniciação científica é testar a ideia de usar um k-mapa logístico (1)como gerador de números aleatórios para um sistema de criptografia baseado na criptografia OTP. Esse gerador em específico foi escolhido por apresentar boas qualidades como PRNG e altíssima velocidade. A velocidade, a qualidade e a viabilidade do sistema foi avaliada durante a pesquisa.Nesse trabalho foi implementado uma classe de criptografia em c++ usando uma biblioteca de precisão arbitrária para iterar o mapa logístico.A criptografia se dá por somar o valor (em ascii) do caracter a ser criptografado com o valor aleatório gerado pelo k-mapa logístico e tirar o módulo 256 do resultado. O valor aleatório foi obtido de 2 maneiras: Usando a metodologia normal do k-mapa (1), em que o novo estado é multiplicado por 10^k e tem a parte inteira removida, ou usando o que chamamos de i-mapa logístico, em que o novo estado é multiplicado por 2^i e tem a parte inteira removida.A segunda opção foi escolhida por poder aumentar a velocidade em sistemas computacionais. A qualidade da criptografia foi avaliada usando o TestU01 (2)e a velocidade foi avaliada usando o comando*time* do linux para encriptar um arquivo de 2.7Gb. Os testes de qualidade não apresentaram diferença com a mudança do cálculo do gerador aleatório, mas sim com a mudança do parametro. Foi descoberto que valores entre 8 e 20, inclusive, apresentam boas propriedades. A velocidade também não apresenta muita variação, fazendo as 2 possibilidades serem igualmente rápidas, precisando de aproximadamente 22 minutos para encriptar o arquivo, dando uma média de 2Mb/s.

Referências:

1 MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Improving the pseudo-randomness properties of chaotic maps using deep-zoom. **Chaos** : an interdisciplinary journal of non linear science. v. 27, n. 5, p. 053116-1-053116-14. 2 L'ECUYER, P.; SIMARD, R. TestU01: A C library for empirical testing of random number generators. **ACM Transactions on Mathematical Software** , v. 33, n. 4, p. 22-1-22-40, 2007.

73

IC44

Acoplamento de um filtro sintonizável de cristal líquido em um microscópio óptico para obtenção de imagens multiespectrais de lâminas histológicas.

BELOTTI, H. ; PRATAVIEIRA, S. ; GARCIA, M.

hare_belotti@df.ufscar.br

A utilização de imagens multiespectrais tem sido altamente abordada em diversas áreas nos campos científico e comercial, desde arqueologia à biomedicina. Dentre suas vantagens, as imagens multiespectrais possuem um grande conteúdo de informações, tendo em vista a ampla gama do espectro eletromagnético que as mesmas podem abordar, além de oferecerem um rápido controle eletrônico via software. Dentre suas aplicações, podemos citar o diagnostico nao-invasivo de doenças, e as orientações cirúrgicas em tempo real.(1)Esse estudo tem por finalidade o desenvolvimento de um aparato experimental capaz de adquirir imagens multiespectrais controlado por um software produzido via Labview (National Instruments, EUA), além do processamento de imagens de lâmina histológica, por exemplo de lesões de pele malignas. Será utilizado um filtro sintonizável de cristal líquido (LCTF, do termo em inglês, liquid crystal tunable filter), filtro este de interferência óptica de alta qualidade controlado eletronicamente, com comprimentos ondas do espectro visível e próximo do infravermelho que são eletronicamente controláveis, o qual será acoplado ao microscópio óptico, entre a câmera e a lâmina histológica, controlados por uma interface gráfica.O método consiste em utilizar diferentes comprimentos de ondas abordados pelo LCTF para aquisicionar uma imagem multiespectral de lâminas histológicas, a fim de obter mais informações do que aquelas contidas em uma imagem microscópica convencional. A ferramenta para o controle do sistema utilizada será um programa escrito no software LabView, para controlar a câmera digital e obter as imagens multiespectrais simultaneamente ao funcionamento do LCTF durante todo o processo. Nesse software, será possível implementar uma interface amigável com o usuário, possibilitando controle das propriedades de cada aquisição, como quais comprimentos de onda serão utilizados para filtragem, o passo entre eles e até mesmo o processamento das imagens adquiridas.

Referências:

1 LU, G.; FEI, B. Medical hyperspectral imaging: a review. **Journal of Biomedical Optics,** v.19, n.1, p.10901,2014.

IC45
Cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores III-V

SIQUEIRA, A.
anderson.siqueira@usp.br

A determinação de estrutura de bandas é de grande importância para o estudo de fenômenos ligados à Física do Estado Sólido como, por exemplo, no estudo de fases topológicas da matéria, ou para o desenvolvimento de novas tecnologias como a spintrônica e os lasers de spin.As estruturas de bandas são obtidas por métodos experimentais ou teóricos. Neste trabalho, essas estruturas são obtidas através do modelo teórico do método **k.p** . O método **k.p** é um modelo teórico para o cálculo das estruturas de bandas onde as interações são descritas por parâmetros em um Hamiltoniano em sua forma matricial.(1) Neste modelo é usada a aproximação de elétrons independentes(2) onde as interações elétron-elétron e elétron-núcleo são substituídas por um potencial efetivo. Por se tratar de um sistema contendo uma grande quantidade de átomos, o método **k.p** apresenta a vantagem, em relação aos métodos atomísticos, de ter um baixo custo computacional.Os parâmetros presentes no método **k.p** , podem ser obtidos por meio de medidas experimentais massas efetivas feitas através de procedimentos como: ressonância ciclotrônica, piezotransmissão efeito Hall entre outros. Outra forma de obter os parâmetros **k.p** é por meio de *fits* em estruturas de bandas pré calculadas. Essas estruturas de bandas são obtidas em simulações computacionais baseadas em outros métodos teóricos, como o *tight-biding* , por exemplo. Os parâmetros usados neste trabalho, foram retirados da literatura. (3)O objetivo deste trabalho é reproduzir e aplicar o formalismo do método **k.p** para determinar as estruturas de bandas de um cristal *bulk* de GaN na fase WZ e também, do poço quântico AlGaN/GaN.

Referências:

1 BASTO, C. M. de O. **Determinação de parâmetros para hamiltonianos k.p a partir de estruturas de bandas pré-existentes** .2015. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos,Universidade de São Paulo, 2015. 2 FARIA JUNIOR, P. E. de. **Nanowhiskers politípicos:** uma abordagem teórica baseada em teoria de grupos e no método k.p. 2012. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto e Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2012. 3 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. **Journal of Applied Physics** , v.94, n.6, p.3675–3696, 2003.

75

IC46

Desenvolvimento de técnica para processamento de imagens de microscópio especular

MORAIS, F. O. ; OLIVEIRA, A. O. ; OLIVEIRA, L. O. ; CASTRO NETO, J. C.
felipeom@usp.br

O presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um software para detectar e contar células de imagens provenientes de um microscópio especular. O microscópio especular é responsável por realizar um exame que registra imagens do endotélio corneano, permitindo ao oftalmologista avaliar a densidade e a qualidade das células presentes na região de amostragem, cujo resultado pode ser estendido para todo o endotélio. (1) Esse exame tem grande importância e é realizado no pré-operatório da cirurgia de catarata, de cirurgias refrativas e corneanas, assim como para o controle do uso de lentes de contato e avaliação de doenças na córnea. (1) Uma imagem coletada nesse exame possui, em geral, mais de uma centena de células. Dada a dificuldade de contar as células de cada imagem individualmente (2), foi desenvolvido um programa na linguagem de programação Python e usando ferramentas de Visão Computacional que permite automatizar essa contagem e realizá-la em uma fração de segundo. É necessário apenas saber previamente a área contida em cada imagem, e a partir do número de células nessa área contado pelo programa é calculada a densidade. Todas as ferramentas de programação utilizadas são Open Source, sendo, além da linguagem de programação Python, as bibliotecas OpenCV, Numpy e Matplotlib, o que significa que a criação e utilização do software não requerem por si só nenhum custo.

Referências:

1 BONNELL, A. J.; CYMBOR, M. Under specular the microscope: take a closer look at the clinical and financial benefits that non-contact specular microscopy could offer your practice. **Review of Optometry** , v. 149, n. 8, p. 58-64, 2012. 2 HUANG, J. *et al.* Comparison of manual and automated analysis methods for corneal endothelial cell density measurements by specular microscopy. **Journal of Optometry** , v. 11, n. 3, p. 182-191, 2018.

76

IC47

Terapia fotodinâmica por excitação de dois fótons em células de melanoma

NAKADA, P. J. T. ; PIRES, L. ; ROMANO, R. A. ; KURACHI, C.
paulinho.nakada@gmail.com

Atualmente, dentre os diversos tipos de cânceres diagnosticados no Brasil e no mundo, o câncer de pele é o tipo mais frequente. O tipo mais agressivo de câncer de pele é o melanoma, no qual é originado de melanócitos e é caracterizado por lesões pigmentadas com alto potencial metastático. Mesmo possuindo apenas 3 % dos casos, o melanoma causa 79 % das mortes relacionadas a este tipo de câncer de pele. As abordagens empregadas para o tratamento dessa doença são muitas vezes a resseção cirúrgica para remoção da lesão cutânea, a quimioterapia, radioterapia e imunoterapia, dependendo do estadiamento da lesão. No entanto, esses tratamentos possuem baixa eficácia em comparação aos efeitos colaterais gerados e, muitas vezes, são apenas efeitos paliativos. Apesar da sua baixa incidência, o melanoma apresenta altas taxas de morbidade e mortalidade quando diagnosticada em estágios avançados. Esta é a razão pela qual o desenvolvimento e melhoria das opções de tratamento são relevantes. A terapia fotodinâmica (PDT) está sendo investigada em muitos estudos. A reação fotodinâmica para indução de morte celular ocorre principalmente pela produção de oxigênio singleto, uma espécie altamente reativa e oxidativa entre outras espécies reativas de oxigênio (ROS). No caso do melanoma cutâneo, devido à alta concentração de melanina, um dos principais absorventes biológicos devido à sua pigmentação, a PDT apresenta uma fraca resposta devido à grande limitação da penetração da luz no tumor.(1) Uma estratégia para o tratamento do melanoma seria utilizar a técnica de terapia fotodinâmica por excitação de dois fótons (TPE-PDT), permitindo a ativação do PS em regiões do infravermelho próximo (NIR), onde a melanina possui uma janela terapêutica devido a sua baixa absorção, facilitando a distribuição e penetração de luz nas células melanóticas. Esta técnica é devida ao confinamento espacial e temporal da luz incidente. Neste contexto, o objetivo deste projeto é avaliar o TPE-PDT em células de melanoma *in vitro* , na presença de Oxdime, que possui uma grande secção choque para absorção de dois fótons. (2)

Referências:

1 HUANG, Y. *et al.* Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry** , v. 394, n. 2, p. 239–250,2013. 2 KHURANA, M. *et al.* Biodistribution and pharmacokinetic studies of a porphyrin dimer photosensitizer (Oxdime) by fluorescence imaging and spectroscopy in mice bearing xenograft tumors. **Photochemistry and Photobiology** , v. 88, n. 6, p. 1531–1538, 2012.

77

IC48

Montagem de um aparato experimental para observação de LASERS randômicos

FERREIRA, P. R. ; ALMEIDA, J. M. P. ; BONI, L.

paulina.ferreira@usp.br

No âmbito da aplicação de lasers, observaram-se grandes avanços na última década, incluindo o surgimento de dispositivos de amplificação da luz sem cavidade, que permitiu diversas aplicações na área de sensores. (1) Os Lasers Aleatórios (LA), gerados por amostras de pequenas dimensões e grande poder de espalhamento vêm sendo usados para diagnósticos, análise de composição de substâncias, entre outras aplicações. (2) O presente estudo (continuação do projeto desenvolvido pelo estudante Leonardo Franklin) procura utilizar a montagem experimental para geração de LA utilizando amostras compostas por clusters de nanopartículas metálicas fabricados por fs-LIFT como meio de ganho. Sendo fs-LIFT – Laser Induced Forward Transfer, uma técnica de processamento de materiais de alta resolução, fundamentada na vaporização e deposição controlada de materiais. O diferencial da técnica, que leva à sua aplicação neste estudo, é o aparecimento de nanopartículas (NPs), em particular NPs de ouro, sendo aqui utilizadas como centros espalhadores. (3) Trabalhos preliminares demonstram que potências mais altas e velocidades de varredura mais baixas tendem a produzir amostras de meio de ganho mais adequadas para o uso dessas estruturas em experimentos de LA. Como proposta de aplicação, o trabalho procura construir um sensor óptico de hibridização de DNA, material que interage com a superfície de NPs formando complexos capazes de modificar o espectro de absorção do material. Espera-se, portanto, que esse conjunto NP+DNA na presença de rodamina, seja possível observar emissão laser característica.

Referências:

1 CAO, H. Random lasers: development, features and applications. **Optics Photonics News** , v. 16, n. 1, p. 24-29, Jan. 2005. 2 ABEGÃO, L. M. G. Measuring milk fat content by random laser emission. **Science Reports** , v. 6, p. 35119-1-35119-4, Oct. 2016. doi: 10.1038/srep35119. 3 WIERSMA, D. S. The physics and applications of random lasers. **Nature Physics** , v. 4, n. 5, p. 359-367, May 2008.

78

IC49

Estudo do efeito vascular da terapia fotodinâmica e curcumina no modelo de Membrana Corioalantóica

FERREIRA, G. C. ; BAGNATO, V. S. ; BUZZÁ, H. H.
giane.ferreira@usp.br

O modelo de Membrana Corioalantóica (CAM) de ovos de galinha possibilita o acesso direto aos vasos sanguíneos e, portanto, é um ótimo modelo para realizar estudos de efeito vascular. O principal objetivo deste estudo é utilizar o modelo CAM para avaliar o efeito combinado do fotossensibilizador com os efeitos antiangiogênicos da curcumina. A Terapia Fotodinâmica (TFD) é um tratamento que requer luz, um agente fotossensibilizante (FS) e oxigênio molecular. A interação entre luz e FS transforma o oxigênio molecular em oxigênio singleto, o qual é altamente reativo e responsável pela morte celular. (1) A curcumina é usada porque é um fotossensibilizador natural. Ovos de galinha foram obtidos de um produtor local (A´DORO S.A., São Carlos / SP, Brasil) e, no terceiro dia de desenvolvimento, uma janela foi aberta na casca. Os ovos foram mantidos na incubadora em 37,7° C até o 11° dia, e formulações de géis à base de curcumina foram aplicadas sobre uma região da membrana corioalantóica. Um anel de Teflon® de 1,0 cm de diâmetro foi usado para limitar a solução de curcumina na CAM e na área de irradiação e análise. As formulações em gel de curcumina a 0,5 mM foram feitas a partir de um creme e uma solução de curcumina e o tempo de incubação foi de 40 minutos. A TFD foi realizada com LED em 450 nm, irradiância de 50 mW/cm^2 e 5 minutos de iluminação, totalizando doses. de 15 J/cm^2. As imagens foram coletadas usando uma câmera USB Microscópio Digital antes da aplicação, a cada 30 minutos nas primeiras três horas e 24 horas após o tratamento. As imagens obtidas foram analisadas medindo-se o diâmetro dos vasos sanguíneos antes e após o tratamento da terapia fotodinâmica e com o uso de apenas curcumina sem luz. Os grupos controle, apenas com luz e somente com o anel de Teflon®, não apresentaram alterações significativas no diâmetro dos vasos. Enquanto os grupos com apenas curcumina apresentaram redução de diâmetro, o grupo com curcumina associado à luz apresentou maiores níveis de redução no diâmetro do vaso. Com essa análise preliminar, foi possível observar que a curcumina na verdade possui um efeito antiangiogênico intrínseco. Além disso, a associação de curcumina com luz (terapia fotodinâmica) tem efeitos antiangiogênicos mais fortes. Serão testados outros volumes e concentrações de gel de curcumina e doses de luz e serão utilizados outros métodos de avaliação do nível de efeito antiangiogênico, a fim de melhorar a análise e encontrar um protocolo que maximize o efeito antiangiogênico, mantendo o embrião vivo.

Referências:

1 BUZZÁ, H. H. *et al.* Vascular effects of photodynamic therapy with curcumin in a chorioallantoic membrane model. **International Journal of Molecular Science** , v. 20, n. 5, p. 1084-1-1084-12, 2019.

79

IC50

Análises computacionais de condensados de Bose-Einstein turbulentos

MARINO, Á. V. M. ; MADEIRA, L. ; TELLES, G. D. ; BAGNATO, V. S.
attis.marino@gmail.com

Desenvolveu-se um conjunto de ferramentas computacionais para extrair, de forma automatizada, quantidades físicas de interesse a partir de imagens de absorção de condensados de Bose-Einstein (BECs) excitados por perturbações oscilatórias. (1) O processamento de imagens realiza a remoção de ruído, detecta a nuvem condensada e determina a região de interesse, a qual será usada para extrair a densidade de momentos, calculada a partir da densidade óptica radial. (2) O espectro de energia é obtido diretamente da densidade de momentos, dada a hipótese de que a nuvem encontra-se em regime cineticamente dominado. Um outro conjunto de ferramentas também foi desenvolvido para extrair estas mesmas quantidades, desta vez, a partir de uma simulação computacional 3D de um BEC aprisionado (in situ) em regime turbulento. Porém, neste caso, a densidade de momentos é calculada pela transformada de Fourier da função de onda e o espectro de energia cinética é obtido através do campo de velocidades, relacionado às densidades de correntes de probabilidade. (3) Em ambos os casos, essas quantidades físicas são de grande importância para o futuro desenvolvimento de um modelo termodinâmico fora de equilíbrio para descrever o transporte de energia e partículas em superfluidos quânticos turbulentos.

Referências:

1 TAVARES, P. E. S. **Excitations in Bose-Einstein condensates** : collective modes, 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. 2 VIVANCO, F. A. J. **Investigations on momentum distributions and disorder in strongly out-of-equilibrium trapped Bose gases** . 2017. 120 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017. 3 SANTOS, A. C. **Quantum turbulence and multicharged vortices in trapped atomic superfluids** . 2017. 109 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

80

IC51

Estudo da cristalização isotérmica de um vidro de diopsídio contendo 6,5 mol% de Fe2O3

RICARTE, A.

dri_ricarte@hotmail.com

As vitrocerâmicas à base de 25.0CaO.25.0MgO50SiO2 (diópsido, CMS2) ganharam grande interesse devido às suas interessantes propriedades e potencial aplicação em diferentes áreas. O vidro diópsidio de composição estequiométrica 25.0CaO.25.0MgO50SiO2 (CMS2) exibe apenas um mecanismo de nucleação de superfície. (1) No entanto, a adição de agentes nucleantes ao vidro permite que a cristalização ocorra por um mecanismo de nucleação e crescimento no volume durante o tratamento térmico da amostra. Além disso, para obter materiais vitrocerâmicos de estrutura e propriedades desejadas, é necessário o controle da temperatura do processo de cristalização. (2) O objetivo deste trabalho é avaliar a cinética de cristalização de um vidro CMS2 contendo 7 mol% de Fe2O3 por meio de análises térmicas e microestruturais. A amostra vítrea foi obtida através do método de fusão e moldagem. Para realizar o estudo de cristalização, inicialmente foram determinadas as temperaturas características da amostra como a temperatura de transição vítrea (Tg) e temperatura de cristalização (Tc). Os resultados obtidos mostraram que a adição de 6,5 mol% de Fe2O3 foi eficiente para promover a cristalização no volume da amostra. A temperatura onde ocorre a máxima taxa de nucleação foi determinada como sendo muito próxima a temperatura de transição vítrea.

Referências:

1 ZANOTTO, E. D. Surface nucleation in a diopside glass. **Journal of Non-Crystalline Solides** , v. 130, n. 2, p. 217-219, 1991. 2 ZANOTTO, E. D. A bright future for glass-ceramics. **American Ceramic Society Bulletin** , v. 89, n. 8, p. 19-27, 2010.

IC52

Oxímetro ótico digital para tecnologia biofloco em aquicultura

LUCCAS, G. A. A. ; CASTRO NETO, J. C.

giovana.luccas@usp.br

A aquicultura é caracterizada pela criação de organismos aquáticos em ambientes controlados, ou seja, que não estão conectados abertamente a rios e mares. (1) Ao se tratar de um ecossistema aquático, existem fatores críticos a serem considerados para a otimização de produção da espécie cultivada, esses fatores são: controle da taxa de oxigênio, nível de amônia e amônio na água, o potencial hidrogeniônico dos tanques de cultivo, temperatura, salinidade da água e a existência de microrganismos que podem desregular o equilíbrio do ecossistema. (1) Ao utilizar a tecnologia do Biofloco na aquicultura, são obtidos diversos benefícios ambientais, uma vez que permite o reuso da água nos tanques, além de servir de alimento para algumas espécies heterotróficas. (2) O foco da pesquisa se dá para a aquicultura de camarão, uma vez que esses crustáceos possuem certas características interessantes a serem consideradas, como ser extremamente sensível às mudanças de oxigênio. Define-se oxímetro como um instrumento que determina fotoeletricamente a saturação de oxigênio em um meio, já o oxímetro ótico é aquele que possui sensores de captação de luminescência para determinar as taxas de oxigênio de um meio.(3) O Objetivo principal das atividades realizadas até agora para o andamento do projeto foi a pesquisa bibliográfica básica e criar um protótipo de sensor de oxigênio dissolvido, além de criar um ambiente controlado para realizar as medições e sua curva de calibração. Para dar início a montagem do protótipo de sensor de oxigênio dissolvido, foi necessário criar um ambiente controlado que pudesse se encaixar nas medidas do vidro coberto pelo filme de sol-gel contendo Rutênio II, que é sensível ao oxigênio reagirá com o oxigênio gerando fluorescência e fosforescência, resultado da oxidação. Para tal um protótipo foi montado no software SolidWorks 9000 (SolidWorks Corporation, Waltham, MA), sua estrutura se assemelha com um copo sem fundo, onde será adicionado o filme. Foram feitas diversas cópias do mesmo na impressora 3D Stratasys F170 (Stratasys Ltd,, Rehovot, Israel). Foi montado um protótipo inicial do sensor utilizando uma sonda da Ocean Optics (FOXY-R PROBE with overcoat), um espectrômetro da Ocean Optics (USB2000+VIS-NIR), uma fonte de tensão da Minipa (MPC-303DI), um LED de excitação com comprimento de onda de 470nm, um notebook e o software SpectraSuite, também da Ocean Optics e um filtro passa-alta. Dissolvendo peróxido de oxigênio 50% em água destilada, ambos em diversas concentrações, foi possível realizar diversas curvas do espectro do oxigênio reagindo com o Rutênio II, a fim de realizar a calibração do protótipo. O próximo passo será realizar os ajustes necessários para que sejam realizadas medições mais precisas, verificando a calibração dos instrumentos, será necessário programar um processador que possua um conversor A/D (inicialmente Arduino) para que ele realize a conversão de medidas, de voltagem (V) ou corrente (A) para miligramas por litro (mg/L). Nessa etapa será necessária a realização de mais pesquisas na área de eletrônica e programação em C, além de entrevistas com engenheiros mecatrônicos e outros profissionais com conhecimento na área de eletrônica. Caso seja verificada eficiência no protótipo com o Arduino, será possível passar para plataformas de prototipagem mais eficientes para uso comercial. Podendo, então, estudar formas de compactar os componentes de forma que se torne portátil.

Referências:

1 TIMMONS, M. B.; EBELING, J. M. Water quality. In: **Recirculating aquaculture** . 2nd ed.

Ithaca, Ny: Cayuga Aqua Ventures, LLC, 2010. cap. 2, p. 51-52. 2 RIBEIRO, L. F. *et al*. Desafios da carcinicultura: aspectos legais, impactos ambientais e alternativas mitigadoras. **Revista de Gestão Costeira Integrada** , v. 14, n. 3, p.365-383, 2014. 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 p. Tese (Doutorado em Engenharia Eletrica) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007.

83

IC53

Análise da atividade da acetilcolinesterase cerebral e muscular de Piaractus mesopotamicus expostos a multiestressores ambientais nanoestruturados e poluentes comuns

TAKEUTI, N. ; VENTURINI, F. ; ZUCOLOTTO, V.

naylanaomi@usp.br

As nanopartículas (NPs) de carbono vêm sendo aplicadas em diversas áreas, devido às suas interessantes propriedades físicas. Em consequência disso, a presença das NPs no ambiente aquático é cada vez mais relevante, podendo haver uma interação entre estes nanomateriais e poluentes advindos da agricultura. Isso mostra a necessidade da criação de regulamentações para lidar com os novos compostos e os futuros descartes, visando a proteção da biota não-alvo. A nanotoxicologia é a ciência que une a nanotecnologia e a toxicologia, ou seja, utiliza os testes toxicológicos para avaliar os impactos de nanopartículas, auxiliando assim em regulamentação e controle no meio ambiente. (1) Os testes são feitos utilizando compostos encontrados no ambiente que são possivelmente tóxicos. (2) Este trabalho tem como objetivo avaliar a inibição da enzima acetilcolinesterase (AChE) por um pesticida amplamente utilizado, o clorpirifós (CPF), juntamente com o óxido de grafeno (GO), uma NP com muitas aplicações. Para isso, foram feitos testes de exposição subletal no peixe de água doce pacu Piaractus mesopotamicus. Os seguintes tratamentos foram testados: 1) controle (somente água de cultivo, sem adição de xenobióticos); 2) GO 1 mg/L ; 3) GO 0,1 mg/L; 4) CPF 30 μg/L; 5) GO 1 mg/L + CPF 30 μg/L; 6) GO 0,1 mg/L + CPF 30 μg/L. As exposições foram realizadas durante 48h. Ao final deste período, o cérebro e o músculo foram coletados e armazenados a -80ºC para análise da atividade da AChE. A atividade da AChE mostrou significativa diminuição em relação ao controle na exposição ao CPF (61,3% para cérebro e 65,3% para músculo) e ao conjunto GO 1 + CPF (80,3% para cérebro e 76,3% para músculo); além disso foi observado diferença nos resultados da interação com o GO e com o CPF em relação aos expostos individualmente. Esses resultados demonstram que a toxicidade do GO combinada com o organofosforado afetam significativamente a atividade da AChE, prejudicando as ações que dependem de um funcionamento pleno deste sistema, tais como: caça, atividades motoras e sensitivas, e seu sistema regulatório no geral. Tais prejuízos podem ser nocivos não só aos indivíduos, mas também à cadeia alimentar da qual fazem parte, afetando todo o ecossistema. Estes resultados ressaltam a importância da avaliação da toxicidade dessa NP em conjunto com um poluente clássico presente no ambiente aquático, e podem contribuir com a regulamentação da presença de concentrações seguras destas NP em corpos d'água, a fim de preservar a biota aquática.

Referências:

1 ANDERIES, J. M.; WALKER, B. H.; KINZIG, A. P. Fifteen weddings and a funeral: case studies and resilience-based management. **Ecology and Society** , v. 11, n. 1, p. 21-1-21-12, 2006. 2 ESPI´NDOLA, E. L. G. *et al.* (ed). **Ecotoxicologia** : perspectivas para o se´culo XXI. São Carlos: RiMa Artes e Texto, 2000.

IC54

Magnetic island bifurcation due to resonant magnetic perturbations

ASNIS, Y. ; EVANS, T. ; CANAL, G.
yuriasnis@gmail.com

Fusing atoms together in a controlled way releases nearly four million times more energy than a chemical reaction such as the burning of coal, oil or gas, and four times as much as nuclear fission reactions, with the advantage of not emitting harmful toxins like carbon dioxide or other greenhouse gases into the atmosphere. Therefore, the potential of nuclear fusion to provide a practically inexhaustible source of clean and renewable energy has motivated scientists for many decades to work toward developing nuclear fusion power plants. Among many concepts, the so-called tokamak concept is, at present, the most promising approach for exploiting thermonuclear fusion. Although the tokamak device is the most prominent candidate, several scientific and technological challenges impose severe constraints on the path towards a self-sustained fusion burning plasma. (1) To become economically attractive, tokamaks will have to operate in the so-called high confinement mode, whose ubiquitous feature are repetitive instabilities known as edge localized modes (ELM). These instabilities release unacceptably high fractions of the thermal energy of the plasma to the first wall of the device thus driving the need for ELM control strategies. Studies worldwide have demonstrated that the presence of relatively small non-axisymmetric resonant magnetic perturbations (RMP) can be used to suppress ELMs. Recent calculations using the resistive MHD code M3D-C1 of the linear response of spherical tokamak plasmas to RMP fields revealed a new class of magnetic field line bifurcations that do not fit into the well-accepted magnetic reconnection theory. (2) These results not only challenge reconnection theory in tokamak plasmas but are particularly important for understanding the underlying physics of self-organization in toroidal fusion plasmas. Depending on the plasma conditions, instabilities can develop when the plasma pressure is increased for better performance. The model most widely used to predict plasma stability is the so-called magnetohydrodynamic model. (3)

Referências:

1 FERRARO, N. M. *et al.* Role of plasma response in displacements of the tokamak edge due to applied non-axisymmetric fields. **Nuclear Fusion** , v. 53, n. 7, p. 073042-1-073042-8, June 2013. 2 FITZPATRICK, R. Bifurcated states of a rotating tokamak plasma in the presence of a static error-field. **Physics of Plasmas** , v. 5, n. 9, p. 3325-3341, Sept. 1998. 3 EVANS, T. E. *et al.* Resonant magnetic perturbations of edge-plasmas in toroidal confinement devices. **Plasma Physics and Controlled Fusion** , v. 57, n. 12, p. 123001-1-123001-42, Nov. 2015.

IC55

Estudo e análise do uso da radiação ultravioleta como método de descontaminação de alimentos

GARCIA, É. B. ; CORRÊA, T. Q. ; BAGNATO, V. S.
erica.garcia@usp.br

A segurança alimentar é um dos temas bastante discutidos na sociedade atual. Com a mudança nos hábitos alimentares e a produção de alimentos em larga escala, houve a necessidade de se aumentar os prazos de validade e o tempo de prateleira dos alimentos perecíveis, por isso a conservação desses alimentos desde sua produção até o armazenamento é de extrema importância. (1) O projeto propõe a aplicação da radiação de luz ultravioleta (UV-C) como método de descontaminação bacteriana em diversos tipos de carne (bovina, suína e branca). Após o tratamento realiza-se a quantificação de morte dos microrganismos e a análise de características físico-químicas das amostras, afim de determinar a eficiência da luz ultravioleta em descontaminar o alimento sem danificá-lo estruturalmente e interferir em aspectos como sabor e aparência. (2)

Referências:

1 LANDGRAF, M. **Fundamentos e perspectivas da irradiação de alimentos visando ao aumento de sua segurança e qualidade microbiológica** . 2002. 87 p. Tese (Livre Docência) - Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2002. 2 LÁZARO, C. A. *et al*. Effects of ultraviolet light on biogenic amines and other quality indicators of chicken meat during refrigerated storage. **Poultry Science** , v. 93, n. 9, p. 2304-2313, Sept. 2014.

86

IC56

Implementação e manutenção de código computacional em framework de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores

PAULI, I. G. ; SIPAHI, G. M.

iangiestas@usp.br

O **LFC** (Laboratório de Física Computacional) ao longo de sua história vem trabalhando em modelos efetivos, usando o método $\mathrm{k} \cdot \mathrm{p}$ para descrever hetero-estruturas e super-redes. Para tanto, foi criado um *software* em Fortran para realizar os cálculos de estrutura eletrônica destes sistemas físicos. Possuindo aproximadamente 100 mil linhas escritos em Fortran e 20 anos de existência, o código acabou acumulando uma série de problemas, tornando a manutenção e a implementação de novas funcionalidades uma tarefa muito complicada. O objetivo do projeto é reimplementar o algoritmo desenvolvido no laboratório, estruturando-o de forma a facilitar a manutenções futuras e a sua utilização como uma biblioteca, usando técnicas de orientação a objetos e práticas modernas em Fortran, conciliando desempenho e praticidade (1), priorizando desempenho onde necessário: nos algoritmos de resolução de sistemas lineares, como o Gradiente Conjugado, e determinação de autovalores e autovetores, como o LOBPCG.(2-3) A nova implementação, ainda que faltando algumas funcionalidades, já conseguiu reduzir em 90% a quantidade de linhas, ao eliminar redundâncias diversas presentes no código antigo e usar bibliotecas externas para manipulação de *strings* e o uso de estruturas de dados do tipo chave-valor. A forma de entrar com dados no programa foi completamente repensada: antes a informação precisava ser escrita em um arquivo de texto pouco intuitivo no qual um caractere em branco fora do lugar ocasionava uma falha na leitura, agora as informações são passadas diretamente ao construtor de cada classe, que pode eventualmente depender de um arquivo externo, como é o caso no carregamento dos parâmetros dos materiais. Dessa forma, pode-se reutilizar o código na construção de uma interface para um usuário mais leigo em programação em um código à parte. Além disso, a implementação de novos hamiltonianos pode ser feita através de expressões muito parecidas com as expressões algébricas.

Referências:

1 CLERMAN, N. S.; SPECTOR, W. **Modern Fortran** : style and usage. New York: Cambridge University Press, 2011. 2 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. **Matrix computations.** 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013. 3 MEYER, C. **Matrix analysis and applied linear algebra.** Philadelphia: SIAM, 2000.

IC57

Cristalização e caracterização de estado sólidos de insumos a base de paroxetina

DETILE, L. ; ELLENA, J. A.
lucas.detille@gmail.com

Com o passar das gerações e o dia-a-dia da população cada vez mais corrido, muitas pessoas acabam por enfrentar doenças psiquiátricas como ansiedade, pânico e até mesmo depressão. Dentro deste contexto a pesquisa na área farmacêutica tem um importante papel para desenvolver e aperfeiçoar insumos que ajudam a tratar tais males. Tal área é responsável desde o planejamento, sintetização até caracterização de compostos biologicamente ativos uteis no processo de combate e prevenção. Muito comumente utilizados em forma de capsulas, os compostos de interesse têm de estar em seu estado de sólido estáveis, podendo ser arranjados de diferentes maneiras dentro de um cristal. Um dos antidepressivos do tipo ISRS (inibidores seletivos de ruptura da serotonina) mais utilizados é a paroxetina, sendo de duas a 23 vezes mais potente, quando comparados com outros antidepressivos. (1) Dentre as barreiras encontradas na utilização de ISRS, uma a ser enfrentada são os efeitos colaterais e propriedades físico-químicas normalmente causados por conta das divergências estruturais, estes que podem ser regulados por meio da Engenharia de Cristais com uso de conformadores. Propriedades como biodisponibilidade, atividade farmacêutica, solubilidade, entre outros são exemplos. (2) O objetivo deste trabalho é o planejamento racional, síntese supramolecular e a caracterização no estado sólido de novas formas cristalinas de insumos farmacêuticos focado na paroxetina e conformadores inorgânicos, afim de aperfeiçoar suas propriedades. São necessários vários métodos para finalmente a cristalização e posteriormente caracterização dos cristais. Os passos seguem desde a extração da base da paroxetina (pois a mesma é encontrada como cloridrato), a escolha do conformador, a cristalização por evaporação do solvente, e posteriormente, a caracterização por métodos como difração de Raio-X, MEV, entre outros.

Referências:

1 LIMA, C. A. M.; BAUMANN, P.; EAP, C. B. Concentrações plasmáticas de paroxetina em pacientes adultos e idosos com depressão. **Revista de Psiquiatria do Rio Grande do Sul** , v. 30, n. 1, p. 13-18, Jan./Apr. 2008. 2 BERNSTEIN, J. **Polymorphism in molecular crystals** . New York: Oxford Clarendon Press, 2002.

88

IC58

Efeitos acústico e fotônico sobre o mesentério em ratos diabéticos

ALVAREZ, C. ; CAMPOS, T. I. T. B. ; DUARTE, A. C. G. O. ; PARIZOTTO, N. A. ; BAGNATO, V. S. ; PAOLILLO, F. R.

alvarez-carol@hotmail.com

O diabetes é uma síndrome metabólica complexa que tem complicações crônicas, o que caracteriza um grande problema de saúde pública. (1) Recentemente, o mesentério deixou de ser apenas uma estrutura anatômica e passa a ser considerado órgão, por demonstrar um papel importante na função de órgãos abdominais. (2) O objetivo deste trabalho foi analisar os efeitos acústicos e fotônicos sobre o mesentério em ratos diabéticos sobre o perfil glicêmico e lipídico. (3) Vinte ratos Wistar machos adultos foram distribuídos em 4 grupos: Grupo 1: ratos diabéticos que receberam o tratamento sham, o equipamento de ultrassom e laser foi aplicado sem a emissão ondas acústicas ou eletromagnéticas; Grupo 2: ratos diabéticos tratados com ultrassom (1 MHz, 1 W/cm2 e modo contínuo); Grupo 3: ratos diabéticos tratados com laser (808 nm, 80 mW e modo contínuo) e; Grupo 4: ratos diabéticos tratados com ultrassom (1 MHz, 1 W/cm2 e modo contínuo) e laser (808 nm, 80 mW e modo contínuo). Para indução do diabetes tipo 2, os animais receberam dieta hiperlipídica e baixa dose de Estreptozotocina. Para o tratamento dos animais, foi utilizado um protótipo baseado em sistema que inclui o laser num orifício central do transdutor de ultrassom. A aplicação do protótipo foi realizada com o uso de gel condutor transparente e movimentos lentos e suaves durante 6 minutos na região abdominal sobre o mesentério, sendo 3 minutos no lado direito e 3 minutos no lado esquerdo. O tratamento foi realizado 3 vezes por semana durante 4 semanas, totalizando 12 sessões. Após jejum e antes da eutanásia, o sangue foi coletado para análise bioquímica. Não foi constatada diferença significativa nos valores de glicemia entre os grupos ($p>0.05$). Entretanto, foi constatada a redução significativa do colesterol total e triglicérides nos grupos tratados com ultrassom e/ou laser ($p<0.05$). Os resultados indicaram que a aplicação do ultrassom e laser sobre o mesentério pode contribuir para melhorar o perfil lipídico em ratos Wistar, indicando a importância do mesentério como órgão endócrino.

Referências:

1 ZIMMET, P.; ALBERTI, K. G.; SHAW, J. Global and societal implications of the diabetes epidemic. **Nature** , v. 414, n. 6865, p. 782-787, Dec. 2001. 2 COFFEY, J. C.; O'LEARY, P. The mesentery: structure, function, and role in disease. **The Lancet Gastroenterology and Hepatology** , v. 1, n. 3, p. 238-247, Nov. 2016. 3 BAGNATO, V. S.; PAOLILLO, F. R. (org.). **Novos enfoques da fototerapia para condicionamento físico e reabilitação** . São Carlos: Compacta, 2014.

IC59

Desenvolvimento de software de controle para um microscópio óptico sem lentes

FEITOSA, P. ; D'ALMEIDA, C. P. ; OLIVEIRA, N. P. ; PRATAVIEIRA, S.
patrickof@usp.br

A microscopia é um dos campos de grande importância para a ciência, uma vez que seu surgimento expandiu a capacidade visualização humana, proporcionando o conhecimento de estruturas não visíveis a olho nu. Desde a criação do primeiro microscópio, utilizando lentes, a área se mostrou promissora e se manteve em expansão. Atualmente têm sido desenvolvidos microscópios sem lentes, que surgem como alternativa a esses equipamentos ópticos tradicionais. Além de possuir uma montagem mais simples, que possibilita uma maior versatilidade, por meio da utilização em diversos ambientes, o equipamento pode gerar imagens com um campo de visão maior, juntamente com uma resolução comparável ou até melhor, dependendo da montagem e funcionamento do sistema. (1) O funcionamento desses microscópios sem lentes necessitam de um processamento digital para gerarem suas imagens. Isso porque a instrumentação é construída de modo a adquirir imagens codificadas das amostras, as quais são chamadas de hologramas. Essa codificação se faz visível por meio de padrões de intensidade, formados pela interferência da luz que passa direto pela amostra e pela luz que difrata na mesma amostra. Um dos possíveis métodos para fazer tal decodificação é o método de multialturas, o qual necessita da aquisição de hologramas com diferentes distâncias da amostra com relação ao sensor para obter uma só imagem final com melhor resolução e com menos influência dos artefatos intrínsecos aos hologramas originais. O microscópio sem lentes que estamos desenvolvendo possui configuração in-line e é constituído por: um led, um pinhole, um sensor CMOS e um transladador. (2) Sendo que os dois últimos são possíveis de serem controlados por software. Por meio disso, esse trabalho tem o intuito de elaborar um software de automação, por meio de algoritmos escritos em Python, para o microscópio citado, que permita o controle da câmera e que também propicie o ajuste e comando digital de passos do sistema de translação do sensor de imagem, promovendo, portanto, uma integração digital entre os dispositivos que compõem nosso microscópio holográfico sem lentes. Em suma, essa integração tem o objetivo de facilitar o uso do microscópio por proporcionar a síntese da programação do hardware em um só programa. Viabilizando o uso dessa instrumentação por usuários não familiarizados com detalhes de seu funcionamento.

Referências:

1 ROY, M. *et al.* A review of recent progress in lens-free imaging and sensing. **Biosensors and Bioelectronics** , v. 88, p. 130-143, 2017. doi: 10.1016/j.bios.2016.07.115. 2 D'ALMEIDA, C. P. **Desenvolvimento e caracterização de um microscópio óptico holográfico sem lentes in-line** . 2018. 76 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018. doi:10.11606/D.76.2018.tde-09102018-081726.

90

IC60

Recuperação de fase em imagens de microscopia óptica holográfica sem lentes

OLIVEIRA, N. P. ; D'ALMEIDA, C. P. ; PRATAVIEIRA, S.
nataliaportes@usp.br

O avanço da microscopia teve um grande impacto no desenvolvimento da ciência. Microscópios com melhores resoluções possibilitaram a caracterização de microrganismos, auxiliaram no tratamento de doenças, e ainda hoje são um dos principais instrumentos usados para o desbravamento dos domínios microscópicos, o que seria impossível para o olho humano fazer sozinho.Contudo, os microscópios modernos podem utilizar de uma estrutura complexa com componentes custosos, o que dificulta a popularização de suas funções. Com isso em mente, foram-se desenvolvendo modelos alternativos desses instrumentos de forma a barateá-los e torná-los mais acessíveis para o público em geral e, principalmente, para comunidades com recursos financeiros limitados. É nesse cenário que os microscópios holográficos sem lentes se tornaram uma opção aos microscópios tradicionais. (1) Como eles possuem uma estrutura simples, como é o caso do modelo usado, constituído de um LED (com emissão em 455 nm), um sensor (CMOS), e um pinhole (150 μm), o seu funcionamento depende do tratamento digital dado à imagem adquirida. Aqui se faz necessária a alusão à holografia, visto que a imagem captada pelo sensor é nada mais do que o padrão de interferência entre dois feixes de luz: um proveniente da luz que que interage com a amostra e o outro do feixe que é transmitido por ela no sensor, sem desvios. A partir da aquisição desse padrão de interferência, ao qual se refere o holograma, é feita uma reconstrução numérica digital para gerar uma imagem com resolução suficiente para ser analisada. Para o processamento envolvido foram implementados algoritmos desenvolvidos em Python cuja função pode ser resumida na recuperação de fase. Como o sensor só capta a informação de intensidade da luz, a informação de fase, muito importante para a qualidade da imagem, é perdida. O método usado para a recuperação de fase nesse projeto pode ser designado como "recuperação de fase Multi-alturas". (2) Nesse processo são captadas 6 imagens da amostra a distâncias diferentes do sensor, depois o cálculo envolvido propaga o campo elétrico de uma imagem para o foco da anterior e assim sucessivamente até obter-se uma imagem com informação de fase adequada. A motivação para o desenvolvimento dos algoritmos em Python se deu pela facilidade de integração com outros sistemas envolvidos no microscópio (câmera, sensor), a rapidez de processamento e as ferramentes e bibliotecas disponíveis para essa linguagem de programação. (3) Numa prospectiva futura, pretende-se aplicar os algoritmos em imagens de cultura de células. O propósito seria reconstruir as imagens adquiridas pelo microscópio óptico holográfico e obter tanto informações quantitativas quanto qualitativas sobre as amostras.

Referências:

1 DIMIDUK, T. G. *et al.* A simple, inexpensive holographic microscope. *In*: DIGITAL HOLOGRAPHY AND THREE-DIMENSIONAL IMAGING, 2010, Miami. **Conference Proceedings[...]** Washington, D.C.: Optical Society, 2010. JMA38. 2 RIVENSON, Y. *et al.* Sparsity-based multi-height phase recovery in holographic microscopy. **Scientific Reports** , v. 6, p. 37862-1-37862-9, 2016. doi: 10.1038/srep37862. 3 BARKLEY, S. *et al.* **Holographic microscopy with Python and HoloPy** . 2018. Disponível em: https://arxiv.org/pdf/1806.00058.pdf. Acesso em: 10 jun. 2019.

IC61

Estudos estruturais e funcionais de xilanases com potencial aplicação biotecnológica

VICENTE, M. L. F.
maria.luiza.vicente@usp.br

Os combustíveis fósseis são responsáveis pela poluição ambiental e a emissão de gases de efeito estufa na atmosfera, a preocupação atual com esses problemas aliada a necessidade energética nos fez buscar novas alternativas de geração de energia, como os biocombustíveis. (1) Dois terços da parede celular dos vegetais como a cana de açúcar é composto por um material lignocelulósico constituído principalmente por quatro polissacarídeos: pectina, celulose, hemicelulose e lignina. (2) A hemicelulose é o segundo maior constituinte na parede celular vegetal, polissacarídeo de estrutura amorfa tem composição variável incluindo polímeros de xilano, arabinoxilano, xiloglucano, glucoronoxilano, galactoglucomano, manana, glucomanano e beta-glucano. A hidrólise do xilano dá-se entre outras, pelas xilanases, estas foram categorizadas como hidrolases de glicosídeos (GH) principalmente em duas famílias, 10 e 11. O objetivo desse trabalho consiste em estudar as enzimas da família GH10 já que por mais amplamente conhecida, a família GH10 possui uma especificidade bastante ampla e por isso é importante identificar suas peculiaridades para que possam incrementar as misturas enzimáticas e gerar um desempenho satisfatório na degradação da biomassa. além de ampliar o leque de enzimas que possam ter alguma aplicação biotecnológica. É de nosso interesse, caracterizar bioquímica e funcionalmente xilanases, bem como determinar suas estruturas cristalográficas que nos darão o conhecimento das estruturas tridimensionais, domínios catalíticos, permitindo conhecer seu funcionamento e interações com substrato mais a fundo. Dois genes da família GH10 foram estudados, incluindo para o primeiro expressão heteróloga, lise e purificação e para o segundo, além do citado anteriormente, ensaio padrão de atividade por PH e temperatura. Como resultado final conseguiu-se obter a solubilidade, purificação e valores de PH e temperaturas ótimas para atividade do segundo gene.

Referências:

1 THANGAVELU, S. K.; AHMED, A. S.; ANI, F. N. Review on bioethanol as alternative fuel for spark ignition engines. **Renewable and Sustainable Energy Reviews** , v. 56, p. 820-835, Apr. 2016. doi: 10.1016/j.rser.2015.11.089. 2 KEEGSTRA, K. Plant cell walls. **Plant Physiology** , v. 154, n. 2, p. 483-486, Oct. 2010.

92

IC62

Optical characterization of metabolics fluorophores NADH and FAD in solution

SOUZA, G. ; ROMANO, R. ; KURACHI, C.
giancarlo.souza@usp.br

Cell metabolism is the set of biochemical processes that occurs in an organism to energy production, cellular development and maintain cell vital functions. (1) Monitoring cellular metabolism can be used to distinguish between healthy and abnormal cells. It can be done by observing some cellular organelles that have an important role in cellular metabolism. In this context, mitochondrial activity can be monitored by native fluorescent electron carriers called NADH and FAD. (2) The optical redox ratio can be calculated between these two coenzymes can be used to estimate cell metabolic process. Therefore, optical characterization of these and other biomolecules is essential to the monitoring cellular metabolism. (3) In this study, synthetic NADH and FAD solutions (Sygma Aldrich) were prepared at different concentrations and, interactions between fluorophores and medium were evaluated by fluorescence spectroscopy. Measurements of stationary state fluorescence and fluorescence lifetime spectroscopy were performed to characterize these biomolecules in solution. For steady-state fluorescence comparison between the two fluorophores, an excitation-emission matrix (Ex. 250-500 nm, Em. 300-650 nm) was determine up for each one of the solutions. Fluorescence lifetime was measured by TCSPC, using a 20 MHz pulsed laser emitting at 378 nm and processed in MATLAB. Average fluorescence lifetimes were calculated also for comparison. Results indicates average lifetime of NADH decreased from 2.10 ns to 1.10 ns when comparing 20 uM NADH solution with 20 uM NADH and 20 uM FAD solution. While excitation-emission matrix showed a possible energy transfer between the fluorophores when concentrations achieved 20 uM NADH and 0.2 uM FAD (Figure 1 (A) and (B)), matrices shows a decrease of intensity of NADH fluorescence, when FAD is present in the solution.

Referências:

1 LIU, Z. *et al.* Mapping metabolic changes by noninvasive, multiparametric, high-resolution imaging using endogenous contrast. **Science Advances** , v. 4, n. 3, p. eaap9302-1-eaap9302-14, 2018. 2 HEIKAL, A. A. Intracellular coenzymes as natural biomarkers for metabolic activities and mitochondrial anomalies. **Biomarkers in Medicine** , v. 4, n. 2, p. 241-263, 2010. 3 BEREZIN, M. Y; ACHILEFU, S. Fluorescence lifetime measurements and biological imaging. **Chemical Review** , v. 110, n. 5, p. 2641-2684, 2010.

93

IC63

Macrófagos como alvos em potencial no tratamento de leucemia promielocítica aguda via receptores CD44 e nanocarreadores de lignina

ANTONIO, L. ; RIBOVSKI, L. ; ZUCOLOTTO, V.

luana.antonio@usp.br

Os macrófagos são células capazes de adotar diferentes polarizações na presença de sinais extracelulares envolvidos em diversas doenças, entre elas o câncer. Em abundância em tumores sólidos, os macrófagos associados a tumores (TAM, do inglês *tumor-associated macrophages*) são alvos terapêuticos importantes.(1)Apesar de nem todo câncer formar um tumor sólido, como é o caso da leucemia promielocítica aguda, ainda podem apresentar macrófagos associados que afetam a progressão da doença. Nanocarreadores (NCs) mostraram-se eficientes transportadores de moléculas para terapia dirigida e a conjugação de ligantes à superfície dos NCs beneficia a entrega sítio específica. Evitar a captação de nanopartículas por células do sistema imune tem sido um grande desafio no desenvolvimento e aplicação de nanocarreadores, entretanto o papel de macrófagos e monócitos na iniciação e agravação de doenças inflamatórias, como câncer, torna essas células alvos interessantes à terapia.(2)Neste projeto propomos analisar a resposta de macrófagos (RAW 264.7) e da linhagem celular NB4 de leucemia promielocítica aguda frente a NCs de lignina contendo curcumina não modificados e modificados com polietilenoglicol (PEG) ou ácido hialurônico (AH). A custer determinant 44 (CD44) é uma glicoproteína expressa em macrófagos que funciona como um receptor que se liga ao ácido hialurônico (AH) e pode desencadear a captação de partículas, além de possuir níveis de expressão distintos para diferentes polarizações dos macrófagos.(3)A modificação de nanomateriais com PEG é comumente utilizada a fim de evitar a captação das partículas pelos macrófagos, enquanto o AH se liga ao receptor CD44 cujos níveis de expressão são alterados para diferentes polarizações dos macrófagos. As respostas das três diferentes configurações serão analisadas *in vitro* como culturas individuais e co-cultura, combinando macrófagos e células leucêmicas. Para os ensaios em co-cultura, algumas razões de macrófagos e células de câncer foram testadas analisando proliferação celular entre co-culturas e as células cultivadas isoladamente. Como ambas as linhagens celulares mantiveram o crescimento e morfologia nas diferentes condições testadas escolheu-se a razão de 1:1 (macrófago:câncer). A captação dos NCs será avaliada por espectroscopia de fluorescência e citometria de fluxo, além de microscopia confocal, enquanto o efeito dos NCS será avaliado por ensaios de MTT, geração de espécies de oxigênio reativo e morfologia celular. Ainda, será estudada a influência da ativação dos macrófagos por lipopolissacarídeos (LPS) na internalização dos NCs modificados com AH.

Referências:

1 SIVEEN, K. S.; KUTAN, G.Role of macrophages in tumour progressio. **Immunology Letters** , v. 123, n.2,p. 97–102, 2009. 2 LRUSCHNER, F. *et al.* Articles therapeutic siRNA silencing in inflammatory monocytes in mice. **Nature Biotechnology,** v. 29, n. 11, p. 1005–1010, 2011 3 VACHON, E. *et al.*CD44 is a phagocytic receptor. **Blood,** v. 107, n. 10, p. 4149–4159, 2019.

IC64

Síntese e caracterização de novas formas sólidas de insumos farmacêuticos ativos (IFAs) usados no tratamento da depressão

MIRANDA, B. R. ; ELLENA, J. A.
beatriz.rathge.miranda@usp.br

A depressão é um transtorno mental mais frequente do que se imagina: de acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS, 2017), a depressão atinge mais de 320 milhões de pessoas em todo o mundo1, e cerca de 6% (11.5 milhões de pessoas) da população brasileira.(1)Os primeiros medicamentos antidepressivos passaram a ser comercializados na década de 50 e, hoje, são encontrados oito diferentes classes de antidepressivos no mercado. Destacam-se os SSRIs (*Selective Serotonin Reuptake Inhibitors*), em especial a Paroxetina (PRX), um IFA (insumo farmacêutico ativo) capaz de atuar no tratamento de todos os tipos de depressão conhecidos, devido aos seus efeitos colaterais mais brandos. Na IUPAC, a PRX recebe o nome *(3S,4R)-3-[(1,3-Benzodioxol-5-yloxy)methyl]-4-(4-fluorophenyl)piperidine* e, comercialmente, se apresenta em duas formas polimórficas: [(PRX.HCl)H2O] e [(PRX.HCl).0.5H2O], sendo a segunda termodinamicamente mais estável que a primeira. Compreendendo a importância de um tratamento adequado para a depressão, o presente trabalho teve como objetivo o desenho, a síntese supramolecular e a caracterização de novas formas sólidas da Paroxetina com propriedades físico-químicas, como dureza, ponto de fusão, solubilidade, reatividade e biodisponibilidade, entre outras, aprimoradas em relação aos IFAs comercializados atualmente, aplicando os conceitos de Engenharia de Cristais. As técnicas usadas para a caracterização de sólidos farmacêuticos foram a difração de raios X por pó (DRXP) e as análises térmicas, como a calorimetria exploratória diferencial (DSC) e a termogravimetria (TGA).

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Depression and other mental health disorders** : global health estimates. Geneva: WHO, 2017.

95

PG1
Misturas de gases ultrafrios diluídos em dimensão mista

CHAVIGURI, J. R. H. ; CARACANHAS, M.
richardhuch@gmail.com

Tendo em vista a recente observação de vórtices e a turbulência em nossos experimentos envolvendocondensado de átomo alcalino 87Rb (1), além do experimento da mistura de duas espécies atômicas,Na e K, que está sendo implementado em nosso laboratório, neste trabalho nos concentramos emexplorar certas característica da nuvem atômica neste regime quântico com o propósito inicial de darsuporte ao nosso grupo de pesquisa experimental. Consideramos dois condensados de Bose-Einstein(BEC), espacialmente sobrepostos, para analisar efeitos da interação entre as espécies na presençade vórtices. O significativo desbalanço entre o número de átomos das duas espécies nos permitiráextrair solução analítica das equações acopladas de Gross-Pitaevskii (GPE). Juntamente com simu-lações numéricas da GPE, essas soluções serão utilizadas para o estudo das propriedades dinâmicase do equilíbrio termodinâmico desse sistema composto.Em um trabalho prévio(2) nós estudamos as propriedades de uma impureza pesada (gás bosôni-cos ultrafrio fracamente interagente) imersa em um BEC composto de uma rede de vórtices, in-teragindo com os modos Tkachenko dessa estrutura. O sistema foi descrito através do modelo deBose-Hubbard estendido, e como consequência da dinâmica intrínseca, nós obtivemos característicasnovas no seu comportamento, tais como: Interação de longo alcance e tunelamento induzido. Essesefeitos modificaram a estrutura do diagrama de fases assim como a transição de fase quântica do sis-tema.Atualmente, nós estudamos um sistema em dimensão mista 2D-3D, composto de uma mistura férmion - bóson de duas espécies atômicas ultrafrias confinadas em armadilha óptica. A seletividade da armadilha de luz nos permite aprisionar uma das espécies em rede óptica unidimensional, enquanto mantemos a segunda espécies em armadilha harmônica tridimensional.(3) Na configuraçãoquase-2D (planos formados pelo potencial da rede óptica 1D), pretendemos aprisionar uma mistura de dois estados hiperfinos do 40 K. Essa configuração estará imersa em um banho formado por um condensado de Bose-Einstein de átomos de Na, aprisionado no potencial óptico 3D. Nosso objetivo será estudar as propriedades dos diferentes regimes que podem ser simulados com esse aparato, variando a razão entre as populações dos estados hiperfinos do 40 K e também a interação entre asespécies 40 K-Na.

Referências:

1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G. ; MAGALHAES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence ofturbulence in an oscillating Bose-Eistein condensate. **Physical Review Letters,** v.103,p.045301,2009.doi:10.1103/PhysRevLett.103.045301. 2 CHAVIGURI, R. H.;COMPARIN, T.; DI LIBERTO, M.; CARACANHAS, M. A. Density-dependent hopping for ultracold atoms immersed in a Bose-Einstein-condensate vortex lattice. **Physical Review A** , v.97,n.2, p. 023614,2018. 3 LAMPORESI, G. *et al.* Scattering in mixed dimensions with ultracold gases. **Physical Review Letters** ,v. 104,n.15, p.153202,2010.

96

PG2
Estudo da Maleabilidade em Áreas Urbanas

DOMINGUES, G. S.
guilherme.domingues@usp.br

O uso da abordagem de Redes Complexas (1) vem crescendo rapidamente em estudos de diversas áreas do conhecimento, como nas biológicas, econômicas, sociais e até mesmo sendo usada na própria estruturação do conhecimento. Neste trabalho, usaremos Redes Complexas para estudar áreas urbanas e como sua topologia pode influenciar em aspectos reais das cidades.Essa abordagem consiste em modelar as cidades estudadas de forma a representar cada cruzamento ou terminação de ruas como um vértice de nossa rede e cada rua ligando dois vértices como uma aresta. Em trabalhos anteriores, utilizamos a modelagem em redes complexas para estudar e classificar cidades ao redor do mundo, buscando entender suas estruturas e características topológicas e como estas são refletidas em aspectos físicos reais das cidades.(2) Estudamos cerca de 1150 cidades e encontramos padrões que indicam estruturas topológicas próprias de cada continente, bem como tendências de certas medidas se relacionarem com propriedades físicas da estrutura das cidades. Agora, buscamos estudar a evolução destas características através da análise da maleabilidade das redes,(3)variando aos poucos sua topologia a fim de identificar possíveis mudanças em sua estrutura que visam maximizar vantagens e minimizar obstáculos de aspectos práticos das cidades, como dinâmicas de tráfego e estratégias de crescimento urbano.

Referências:

1 ALBERT, R. ; BARABASI, A.L. Statistical mechanics of complex networks. **Reviews of Modern Physics**, v. 74, n. 1, p. 47, 2002. 2 DOMINGUES, S.D.; COMIN, C. H.; SILVA, F. N. ; COSTA, L. d. F. Topological characterization of world cities. **Journal Statistical Theory of Experiment**, v.8, 2018.doi:10-1088/1742-5468/aad365. 3 SILVA,F. N. ; COMIN, C. H.;COSTA, L. . F. **Malleability of complex networks**.2018. Disponivel em: arXiv preprint arXiv:1810.09602. Acesso em: 12.06.19

97

PG3

Caracterização do acido aminolevulínico nanoestruturado para melhoria da Terapia Fotodinâmica Tópica

SILVA, G. R. ; SANTOS, A. L. ; SOARES, A. C. ; SANTOS, M. C. ; SANTOS, S. C. ; LIMA, V. R. ; INADA, N. M.

geisiane.silva@usp.br

O desenvolvimento de nanopartículas biopoliméricas visa inúmeras aplicações terapêuticas entre elas tópica e transdérmica para o tratamento de doenças como os cânceres de pele e de útero.(1) Estes nanossistemas quando comparados ao uso de fármacos em escala macro, favorecem tratamentos mais eficazes e menos invasivos.(2) Neste trabalho, nanopartículas (NP) para liberação controlada do pró-fármaco ácido 5-aminolevulínico (ALA) foram sintetizadas a partir do copolímero biodegradável poli(ácido láctico-co-glicólico) (PLGA) pelo método da dupla emulsão seguida da evaporação do solvente orgânico.(1,3) Este nanossistema têm como objetivo principal aumentar a permeabilidade do ALA por todas as camadas da pele, permitindo atingir cânceres de pele mais profundos. Assim, analisamos a estabilidade físico-quimica das NP-PLGA-ALA com monitoramento do pH ao longo do tempo, o tamanho médio (Espalhamento Dinâmico de Luz) e potencial Zeta de acordo com normas da Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) e Food and Drug Administration (FDA).(3) O pH inicial das NP-PLGA-ALA foi de (4,66$\pm$0,02), com tamanho médio (469.1$\pm$5.2) nm e com respectivo potencial Zeta de (-4.62$\pm$0.07) mV, que ao longo de 90 dias permaneceram estáveis indicando estabilidade físico-química. Através da técnica de Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) as NP-PLGA-ALA foram caracterizadas como polidispersas, esféricas e de superfície não rugosa. Pela investigação por Espectroscopia no Infravermelho com Transformada de Fourier (FTIR) e por Espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) indicam que o ALA pode estar adsorvido na matriz polimérica, podendo levar a uma rápida liberação inicial do pró-fármaco. Por fim, a caracterização da polaridade, com análises da energia de superfície e ângulo de contato, corrobora com as análises espectroscópicas, ao indicar que o ALA está influenciando na componente polar do nanossistema, quando comparado as NP-PLGA.

Referências:

1 SCHAFFAZICK, S. R. *et al.* Caracterização e estabilidade físico-química de sistemas poliméricos nanoparticulados para administração de fáracos. **Química Nova,** v.26,n.5, p.726-737,2003. 2 AISHWARYA, S.; SANJAY, K.R. Conjugation study of 5-aminolevulinic acid with microbial synthesized gold nanoparticles to evaluate its effect on skin melanoma and epidermoid carcinoma cell lines using photodynamic cancer therapy. **Gold Bulletin** , v.51, n.11, 2018.doi:/10.1007/s13404-017-0224-x. 3 SHI, L. *et al.* In vitro evaluation of 5-aminolevulinic acid (ALA) loaded PLGA nanoparticles. **International Journal Nanomedicine,** v.8, n.1,p.2669-76, 2013.

PG4

Otimização e elucidação da atividade antibacteriana de peptídeos catiônicos em patógenos multirresistentes

RIGHETTO, G. M. ; LEAL, T. C. ; LOPES, J. L. S. ; SANTOS FILHO, N. A. ; BELTRAMINI, L. M. ; CILLI, E. M. ; CAMARGO, I. L. B. C.

gmrighetto@gmail.com

Apesar dos avanços no tratamento de doenças infecciosas, microrganismos patogênicos continuam sendo uma ameaça à saúde pública devido à sua capacidade de adaptação e resistência aos antibióticos. A escassez de opções terapêuticas leva ao interesse em novos compostos antimicrobianos. Peptídeos antimicrobianos, como a Bothropstoxina-I e Plantaricina 149, estão sendo investigados com esta finalidade. Ambos possuem atividade antimicrobiana relatada(1-2), mas devem ser aprimorados para aplicação terapêutica. Este estudo visa otimizar a ação destes peptídeos, propondo modificações nas moléculas e avaliando sua atividade antimicrobiana, hemolítica e redução de biofilme. Todos os peptídeos foram sintetizados utilizando síntese em fase sólida. Determinamos a concentração inibitória mínima para oito bactérias patogênicas para avaliar o potencial antibacteriano. Eritrócitos humanos foram usados para avaliar a atividade hemolítica e a redução do biofilme foi avaliada usando S. epidermidis ATCC 35984, uma linhagem boa formadora de biofilme.Os primeiros análogos da Bothropstoxina-I sintetizados, (NA1307)K ((KKYRYHLKPF)2K) e E(NA1307) (E(KKYRYHLKPFCKK)2) nos permitiram investigar se a dimerização no C-terminal do peptídeo (usando lisina) ou no N-terminal (usando glutamato) teriam papel na atividade antimicrobiana. (NA1307)K foi o mais ativo contra as linhagens bacterianas testadas, não apresentando hemólise significativa. Nós sintetizamos um terceiro análogo TL1815-KK ((YRYHLKPF)2K) removendo as duas lisinas iniciais, o que reduziu sua atividade, enfatizando a importância de resíduos positivamente carregados na região N-terminal do peptídeo. Os dois últimos análogos testados (NA1896, (KKWRWHLKPF)2K e NA1897, (KKWRWHLKPW)2K) foram modificações do peptídeo (NA1307)K, propostos com a intenção de aumentar a hidrofobicidade da molécula. O peptídeo NA1897 foi o mais ativo de todos testados, mas a taxa de hemólise também aumentou com a hidrofobicidade. Para este grupo de peptídeos não foi observada forte atividade antibiofilme, mas o composto (NA1307)K obteve a maior redução, ((30 $\pm$ 9)%).Pep7 (Fmoc-YSLQMGATAIKQVKKLFKKKGG), um peptídeo baseado na Plantaricina 149, foi sintetizado mantendo o grupo protetor Fmoc, resultando em um aumento na atividade antibacteriana em relação ao peptídeo original, porém com alta hemólise. Pep1 (Fmoc-GATAIKQVKKLFKKKGG) e Pep 5 (GATAIKQVKKLFKKKGG) foram sintetizados planejando reduzir o peptídeo, baseado em estudos que mostraram que esta porção N-terminal não apresentaria atividade.(3) Apenas o Pep1 obteve atividade contra as linhagens testadas, mas com menor atividade antimicrobiana e hemolítica que Pep7. Assim, sintetizamos Pep6 (Fmoc-YATAIKQVKKLFKKKGG) e Pep2 (Fmoc-YAVKKLFKKKG) com o intuito de aumentar a carga positiva no início da molécula. As atividades antimicrobiana e hemolítica foram maiores para o Pep6. Para investigarmos o efeito do Fmoc na atividade, sintetizamos o Pep6 e Pep2 sem este grupo protetor, o que resultou em ausência de atividades antimicrobiana e hemolítica, mostrando a forte influência do Fmoc. Pep2 sem FMOC foi o peptídeo que apresentou maior redução do biofilme ((43 $\pm$ 14)%). Como este peptídeo não apresentou atividade antimicrobiana, sua capacidade de redução deve estar relacionada a outras estruturas do biofilme ou interferência com quorum sensing. Mais análogos serão sugeridos para Bothropstoxina-I e Plantaricina 149, visando obter um peptídeo com o melhor potencial terapêutico. Ensaios para caracterizar mecanismos de ação e toxicidade serão realizados.

Referências:

1 MULLER, D. M.; CARRASCO, M. S.; SIMONETTA, A. C.; BELTRAMINI, L. M.; TONARELLI, G. G. A synthetic analog of plantaricin 149 inhibiting food-borne pathogenic bacteria: evidence for α helical conformation involved in bacteria–membrane interaction. **Journal of Peptide Science** ,v. 13,p. 171–178,2007. 2 SANTOS FILHO, N. A. *et al*. Antibacterial activity of the non-cytotoxic peptide (p-BthTX-I)2 and its serum degradation product against multidrug-resistant bacteria. **Molecules** , v. 22, p.1898, 2017. 3 KRISTIANSEN, P. E.; FIMLAND, G.; MANTIZILAS, D.;ISSEN-MEYER, J. Structure and mode of action of the membrane-permeabilizing antimicrobial peptide pheromone plantaricin A. **Journal Biological Chemistry** , v.280, n.4,p.22945–22950,2005.

100

PG5
Charged Boson star in scalar-tensor gravity

TOMA, C. ; HARTMANN, B. ; BRIHAYE, Y.
ctoma@ifsc.usp.br

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. 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). In order to make a step forward in the understanding of these signals, we have studied the motion of massive and massless test particles in boson star space-times.(1) The former describe e.g. the motion of low mass objects, while the latter are important both in the understanding of light deflection as well as gravitational wave emission.The focus of this upcoming presentation will be a model of a a charged boson star with an additional non-minimal coupling between a gravity scalar and the field strength tensor of the electromagnetic field, in scalar-tensor gravity.(2-3) A collocation method from the COLSYS program was implemented in order to solve the equations of motion. The dependencies of various parameters will be highlighted, for different types of profiles of the gravity scalar (different node branches). The behavior of the coupling between the gravity scalar and the electromagnetic field strength tensor was of particular interest.

Referências:

1 DIEMER, V. ; *et al.* Geodesic motion in the spacetime of a non-compact boson star. **Physical Review D** , v. 88, n.4, p.044025,2013 2 BRIHAYE, Y.; DIEMER, V. ; HARTMANN, C. Charged Q-balls and boson stars and dynamics of charged test particles. **Physical Review D** , v. 89,p. 084048, 2014.doi:10.1103/PhysRevD.89.084048. 3 HERDEIRO,C. A. R. ;RADU, E.; SANCHIS-GUAL,N.;FONT, J. A. Spontaneous scalarisation of charged black holes. **Physical Review Letters** , v. 121, n.10, p.101102,2018.

101

PG6
Uma visão geral sobre o paradoxo de Frauchiger-Renner

ROSSI, V. ; SOARES-PINTO, D.
vinicius.rossi@ifsc.usp.br

Em 1962, Eugene P. Wigner publica seu trabalho " *Remarks on the Mind-Body Question* " para o livro " *The Scientist Speculates: An anthology of partly-baked ideas* ".(1)Neste trabalho, Wigner propõe um *Gedankenexperiment* onde um observador em um laboratório isolado efetua uma medição sobre um sistema quântico de dois estados. Seu amigo, do lado de fora do laboratório, efetua uma medição posterior para determinar o estado do laboratório (que inclui sistema e observador). Os dois agentes discordam sobre a distribuição de probabilidades para os resultados possíveis. Em 2018, o problema do Amigo de Wigner voltou a ser objeto de discussão, após a reconstrução do *Gedankenexperiment* por Daniela Frauchiger e Renato Renner.(2)No artigo, um teorema " *no-go* " é obtido, declarando que qualquer teoria física está fadada a obter um paradoxo neste experimento se esta teoria (1) satisfaz os postulados da mecânica quântica tradicional, (2) proíbe observadores que medem o mesmo sistema ao mesmo tempo de obterem resultados distintos e (3) descarta a hipótese de muitos mundos. O artigo é resultado da tese de doutorado de Frauchiger, que busca destituir postulados probabilísticos da formulação quântica a partir da ótica da falseabilidade.(3) Nosso objetivo é estudar o desenvolvimento desta tese e os argumentos que constroem o *Gedankenexperiment* e seu subsequente teorema " *no-go* ", bem como levantar algumas tentativas de dissolução do paradoxo propostas nos últimos meses pela comunidade científica, rumando para uma futura análise do problema da perspectiva da mecânica quântica relacional.

Referências:

1 WIGNER, E. P. Remarks on the mind-Body question. *In*: GOOD, I. J. (ed.). **The Scientist speculates** : an anthology of partly-baked ideas. Londres: Heinemann, 1962. p.284-301. 2 FRAUCHIGER, D.; RENNER, R. Quantum theory cannot consistently describe the use of itself. **Nature Communications** , v. 9, 3711, 2018.doi:10.138/s41467-018-05739-8. 3 FRAUCHIGER, D. **A non-probabilistic framework for scientific theories** . 2016. Dissertation (Doctor of Sciences) - Federal Institute of Technology Zurique, 2016.

102

PG7

Internalização da photodithazine em parede microbiana de candida albicans visando terapia fotodinâmica

CAFACE, R. ; NIRO, C. ; VICENTE, M. L. ; FRANCISCO, G.
rcaface@usp.br

A terapia fotodinâmica é uma técnica utilizada na descontaminação microbiana e tratamento de infecções que consiste na união de um agente fotossensibilizante, luz no comprimento adequado e oxigênio para desencadear a geração de agentes citotóxicos.(1-2) A interação e ação da molécula Photodithazine® como fotossensibilizador (FS) em Candida albicans (CA) foi caracterizada. Experimentos de internalização temporal e espectral da PDZ em CA foram realizados por microscopia de fluorescência confocal com excitação por 1 (1P) e 2 fótons (2P), para determinar a captação de FS por CA. Demonstrando uma alta internalização induzida pela luz de excitação para FS. Essa indução pode ser realizada em baixas doses de luz 1P e 2P e favorece uma internalização homogênea do FS. Sugerimos a proposição de novos protocolos de PDT que insiram uma baixa dose de pré-iluminação durante o processo de incubação para melhorar a ação do FS com a parede microbiana. Experimente com excitação de luz de LEDs (600 nm). Neste estudo visando a viabilidade celular com doses contínuas de doses leves (dose única) e seriadas, as doses seriadas foram aplicadas para quantificar a exposição à luz em 1J.cm-^{2} com intervalo escuro de 2 minutos. Os resultados demonstraram que o aplicativo serial promoveu maior entrada de FS na célula CA e mostrou morte celular mais precoce em comparação com a dose única do mesmo valor. Mais estudos serão realizados para prever o comportamento dessa internalização precoce da PDZ.

Referências:

1 DEMIDOVA, T. N.; HAMBLIN, M. R. Photodynamic therapy targeted to pathogens. **International Journal of Immunopathology and Pharmacology** , v. 17, n. 3, p. 245–254, 2004. 2 CARMELLO, J. C.; DOVIGO, L. N.; MIMA, E. G.; JORGE, J. H.; COSTA, C. A. S.; BAGNATO, V. S.; PAVARINA, A. C. In vivo evaluation of photodynamic inactivation using Photodithazine® against Candida albicans. **Photochemical Photobiological Sciences** , v. 14, n. 7, p. 1319–1328, 2015.

103

PG8

Caracterização de elementos genéticos móveis envolvidos na transferência do gene blaKPC em bactérias gram-negativas de origem clínica

BORALLI, C. M. S. ; SILVA, G. V. ; CAMARGO, I. L. B. C.
camila.boralli@usp.br

A resistência aos antibióticos está alcançando níveis perigosamente altos em todas as partes do mundo. Infecções de uma lista crescente estão cada vez mais difíceis de serem tratadas, à medida que os antibióticos se tornam menos eficazes. Os β-lactâmicos são atualmente a classe de agentes antibacterianos mais utilizada e agem interrompendo a formação da parede celular bacteriana. As carbapenemases são enzimas com o maior espectro/potencial de degradação de β-lactâmicos e recebem esse nome por conferirem resistência aos antibióticos carbapenêmicos, pertencentes a classe dos penens, apesar de terem potencial para hidrolisar praticamente todos os β-lactâmicos. O gene blaKPC (beta-lactamase *Klebsiella pneumoniae* carbapenemase) codifica uma serina-carbapenemase que vem sendo descrita em várias Enterobacteriaceae.(1)Genes blaKPC foram descritos primeiramente no transposon Tn4401, ambiente genético ao qual se atribui a mobilidade do gene. Porém, alguns casos desses genes em outros ambientes genéticos estão sendo relatados e esses elementos vêm sendo denominados *non-Tn4401 genetic element* (NTEKPC).(2-3) Não se sabe ainda o impacto desta mudança de ambiente genético na disseminação deste gene de resistência, assim, nesse projeto de pesquisa serão analisadas bactérias gram-negativas que contenham gene blaKPC isoladas de infecções de pacientes hospitalizados para verificar o ambiente genético e a abrangência de NTEKPC. Pesquisamos a presença do gene blaKPC em bactérias gram negativas resistentes aos carbapenêmicos de diversas espécies provenientes do Hospital Risoleta Tolentino Neves (Belo Horizonte - MG) e observamos a ocorrência do gene em 75% (40/53) das amostras analisadas. blaKPC foi identificado em linhagens de *Klebsiella pneumoniae* , *Escherichia coli* , *Providencia stuartii* , *Proteus mirabilis* , *Serratia marcescens* , *Pseudomonas aeruginosa* e *Enterobacter* sp. Em seguida, investigamos o ambiente genético que carreia o gene blaKPC por reações de PCR com conjuntos de primers específicos para regiões do Tn4401 e de um NTEKPC identificado em um isolado clínico de Manaus estudado anteriormente no nosso grupo. A presença do Tn4401 foi identificada em apenas 5% das amostras (2/40), porém o NTEKPC não foi encontrado em nenhuma delas. Com isso, observa-se que Tn4401 não é o ambiente genético prevalente nas amostras deste hospital e mais experimentos são necessários para identificação e caracterização dos ambientes genéticos que estão carreando o gene nessas amostras. Em seguida, também serão caracterizados os plasmídeos abrigando os ambientes genéticos, analisando seus tamanhos, estabilidade, bem como o impacto da presença do plasmídeo no metabolismo das bactérias. Com os sequenciamentos do genoma de representantes de cada população clonal poderemos analisá-los genotipicamente, observar seus resistomas e identificar os fatores de virulência presentes.

Referências:

1 ANDRADE, L. N.; DARINI, A. L. C. Bacilos gram-negativos produtores de beta-lactamases: que blablabla é esse? **Journal of infection Control** , v.6, n.1,p.16-25,2017. 2 NAAS, T. *et al.* Genetic structures at origin of acquisition of the β-Lactamase blaKPC gene. **Antimicrobial Agents Chemothe,** v.52, n.4, p.257-63,2008. 3 CHEN, L.*et al.* Carbapenemase-producing Klebsiellapneumoniae: molecular and genetic decoding. **Trends in Microbiology** , v. 22, n.12,p.686-696,2014.

104

PG9

Preparação de microcubos de NaTaO3 pelo método de sal fundido para a fotossíntese artificial

ALVES, G. A. S. ; GONÇALVES, R. V.

gasalves@usp.br

Combustíveis alternativos de mínimo impacto ambiental tem recebido uma atenção considerável nas últimas décadas, podendo-se destacar o gás hidrogênio (H2) como um potencial candidato para substituir gradativamente os combustíveis fósseis. No entanto, hidrogênio é produzido em quase sua totalidade a partir da reforma do metano (CH4), tornando sua produção não sustentável. Uma estratégia promissora é a produção de H2 pela fotodissociação da água em H2 e O2 via fotossíntese artificial, processo no qual moléculas de água são quebradas fotocataliticamente utilizando um semicondutor ideal e luz solar. (1) Neste projeto de pesquisa, foram sintetizados e caracterizados nanocubos e microcubos cristalinos de tantalato de sódio (NaTaO3) pelo método do sal fundido (2) visando a aplicação do material na produção limpa de H2 pela fotossíntese artificial. A reação fotocatalítica utilizando as estruturas de nanocubos de NaTaO3 em suspensão com água e metanol apresentaram uma elevada atividade fotocatalítica para a geração de H2. Para se aprimorar a atividade fotocatalítica do sistema, o estudo servirá de base para o desenvolvimento de heterojunções de NaTaO3/Fe2TiO5 e NaTaO3/WO3, buscando-se obter materiais com morfologias e estruturas de bandas eletrônicas mais favoráveis à absorção de luz solar e à produção eficiente de H2.

Referências:

1 KUDO, A.; MISEKI, Y. Heterogeneous photocatalyst materials for water splitting. **Chemical Society Reviews** , v. 38, n. 1, p. 253-278, 2009. 2 LEE, S. *et al*. Growth of well-developed sodium tantalate crystals from a sodium chloride flux. **CrystEngComm** , v. 12, n. 10, p. 2871-2877, 2010.

PG10
Studies on extensive air shower observables

ARBELETCHE, L. ; SOUZA, L. V.
luan.arbeletche@ifsc.usp.br

Observation of Ultra-High Energy Cosmic Rays (UHECR) and very energetic Gamma-Rays play a fundamental role in the contemporary scenario of multi-messenger astronomy. Lacking the possibility of direct detection of such particles, mostly because of the low flux, current observatories dedicate instruments for indirect observations based on Extensive Air Showers (EAS). EAS are complex particle cascades induced by the interaction of the primary particle with the atmosphere. Two contributions to this scenario are presented related to the parametrization of EAS observables. In the context of UHECR, the distribution of depths at which a cascade reaches its maximum number of particles (X_{max}), which can be detected by employing fluorescence detectors (1), is studied in terms of two existing functional forms - Exponentially Modified Gaussian (EMG) and Generalized Gumbel (GMB) - and one new function is proposed - Log-Normal (LN). A very large number of showers were simulated for four distinct primary masses - proton, carbon, silicon and iron - with energies ranging from 10^{17} eV to 10^{20} eV and three hadronic interaction models: EPOS-LHC, QGSJetII.04, and Sibyll2.3c. The function that best describes the X_{max} distributions is studied in terms of the Akaike information theory and it is shown that the commonly used EMG distribution provides the worst description in all cases, while the GMB is, in general, the best choice for describing X_{max} distributions. The LN distribution is also shown to be a good choice in the proton case. A parametrization of the three functional forms is provided as a function of primary mass and energy for each functional form and hadronic interaction model. Gamma rays in the GeV to TeV range, on the other hand, are typically detected by collecting Cherenkov photons produced by the passage of relativistic shower particles in the atmosphere. (2) While the Cherenkov radiation is well understood from a theoretical point of view, from a phenomenological perspective there is no known parametrization of the angular distributions of these photons that is able to reproduce together both small and large angle distributions in air showers. (3) These angular distributions are studied and a theoretically motivated parametrization of these distributions is provided as a function of shower age in terms of a single parameter.

Referências:

1 BELLIDO, J. *et al*. Depth of maximum of air-shower profiles at the Pierre Auger Observatory: measurements above $10^{17.2}$ V and composition implications. In: INTERNATIONAL COSMIC RAY CONFERENCE, ICRC, 35., 2017, Busan. **Proceedings[...]** Trieste : Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati - SISSA. v. 301, p. 506-1-506-7, 2017. doi: 10.22323/1.301.0506. 2 HILLAS, A. M.; PATTERSON, J. R. Characteristics and brightness of Cerenkov shower images for gamma ray astronomy near 1 TeV. **Journal of Physics G** , v. 16, n. 8, p. 1271-1281, 1990. 3 NERLING, F. *et al*. Universality of electron distributions in high-energy air showers: description of Cherenkov light production. **Astroparticle Physics** , v. 24, n. 6, p. 421-437, 2006.

106

PG11

In vitro assessment of photodynamic therapy using nanoparticles carrying PpIX

LEITE, I. S. ; VIVERO-ESCOTO, J. L. ; LYLES, Z. ; REYES, G. M. ; CANCINO-BERNARDI, J. ; INADA, N. M.

ilaiali.leite@usp.br

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, including cancer. 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. (2) 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 and membrane fusogenic liposomes (MFLs) carrying protoporphyrin IX (PpIX) in vitro, in both tumor and healthy cells. Four polysilsesquioxane-PpIX nanoparticles were studied: silica and PpIX (Ctrl-PpIX-SiNps), 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). MFLs were synthetized with (MFL-PpIX) and without (MFL) the photosensitizer. 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 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 and free PpIX revealed that, when exposed to RR-PpIX-SiNPs, MCF-7 and A431 cells were more prone to PDT cytotoxic effects than the HaCaT cell line. Free PpIX, however, displayed high phototoxicity for MCF-7, A431 and HaCaT cells, inducing more than 90 % of cellular death in both cell lines. When melanoma cells (B16-F10) and fibroblasts (HDFn) are incubated for 24 hours with a final concentration of 1,5-15 μg/mL of MFL-PpIX, it was observed that B16-F10 internalize more PpIX than HDFn however both cell lines display the same viability reduction when irradiated with 50 J/cm^2 of 630 nm. The increased uptake of PpIX in tumor cells results in higher ROS production. When comparing the MFL-PpIX effect on cell viability to free Pplx, it was observed that, for both cell lines, the nanostructured photosensitizer presented lower cytotoxicity in the dark, but promoted the similar damage to the cells when PDT was performed with 50 J/cm^2 Further assays will evaluate mitochondrial membrane potential, apoptosis and necrosis rates, and the MFL-mediated PDT in non-melanoma skin cancer.

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,

UK: Royal Society of Chemistry, 2016. cap. 1. p. 1-21. (Comprehensive Series in Photochemical and Photobiological Sciences) 2 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.

108

PG12

Macroscopic evidence of quantum turbulence in atomic Bose-Einstein condensate from non-classical velocity statistics distribution

OROZCO, A. D. G. ; BAGNATO, V. S.
arnolgarcia@ifsc.usp.br

In a harmonic trap, the momentum distribution for a Bose-Einstein condensate in equilibrium present two components: a Thomas-Fermi for the condensate part and a Gaussian for the thermal part. For a trapped condensate drove far from equilibrium where turbulence is established, recent publication [Phys. Rev. Lett. **104** , 075301 (2010)] (1)predicted that deviation from Gaussian can be considered as a fundamental property for the quantum turbulence. We report a significant change on the high momentum component behavior observed during the expansion of a turbulent cloud generated by excitation of a BEC of $^{87}\mathrm{Rb}$ atoms. A transition from Gaussian to exponential as turbulence progress in the system is observed. We investigate conditions where such behavior occurs and discuss the relevance of such observation, in the general out of equilibrium context (2-3)

Referências:

1 WHITE, A. C. *et al.* Nonclassical velocity statistics in a turbulent atomic Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters** , v.104,p.075301,2010.doi:10.1103/PhysrevLett.104.075301. 2 PAOLETTI, M. S. *et al.* Velocity statistics distinguish quantum turbulence from classical turbulence. **Physical ReviewLetters** , v.101, n.15, p.154501,2008. 3 TSATSOS, M. C. *et al.* Physics Reports,Quantum turbulence in trapped atomic Bose-Einsteincondensates. **Physics Reports** , v. 622, p. 1, 2016. doi:10.1016/j.physrep.2016.02.003.

109

PG13

Evolução dirigida com linezolida e tedizolida de Staphylococcus aureus resistente à meticilina (MRSA) e o impacto frente à sensibilidade de diversos antimicrobianos e à formação de biofilme

ZENATTI, L. ; SILVA, G. V. ; DABUL, A. N. G. ; CAMARGO, I. L. B. C.
leticiazenatti@usp.br

A resistência bacteriana é considerada uma ameaça à saúde global, envolvendo altos custos financeiros. Staphylococcus aureus são bactérias comumente encontradas na microbiota humana, no entanto são patógenos oportunistas responsáveis por infecções recorrentes na comunidade e no ambiente hospitalar. (1) O tratamento de tais infecções, muitas vezes, torna-se um obstáculo devido a interações medicamentosas, problemas de toxicidade dos fármacos disponíveis no mercado e devido aos mecanismos de resistência.(1) Linezolida e tedizolida são antimicrobianos da classe das oxazolidinonas aprovados no Brasil pela Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) em junho de 2000 e dezembro de 2017, respectivamente, cujo mecanismo de ação é através da inibição da síntese proteica .(2) O objetivo do presente projeto é verificar se após realizado processos de evolução dirigida com cada um destes fármacos em uma linhagem de S. aureus há: 1) alteração da sensibilidade às oxazolidinonas e a outros antimicrobianos escolhidos e 2) alteração da capacidade de formação de biofilme. S. aureus SA43, uma bactéria da linhagem ST 5, de origem clínica, com resistência a meticilina, considerada de alto risco, previamente caracterizada pelo nosso grupo (3), será usada na evolução dirigida e será exposta à essas duas oxazolidinonas disponíveis no mercado. A exposição será in vitro por 34 dias consecutivos em paralelo para os dois fármacos em diferentes concentrações. O perfil de sensibilidade a diversos antimicrobianos das linhagens obtidas com a evolução dirigida será determinado por disco difusão ou por microdiluição em caldo, determinando a concentração inibitória mínima, seguindo as recomendações do CLSI (2018) e BrCAST, onde verificaremos se houve alterações com relação à amostra inicial. A capacidade de formação de biofilme será acessada pelo teste qualitativo com cristal violeta. Caso haja alteração de sensibilidade aos antimicrobianos testados, buscaremos por determinantes de resistência através de sequenciamento de genes codificantes das proteínas ribossomais L3, L4, L22 e do domínio V do 23S rRNA, já descritos na literatura, para verificação de mutações. O material genético será extraído, os genes de interesse serão amplificados por PCR, purificados e sequenciados pelo método de Sanger. Esperamos avaliar a facilidade de se obter mutantes resistentes a esses fármacos e, avaliar o impacto da exposição a estas oxazolidinonas frente a outros fármacos usados na clínica a partir de uma linhagem brasileira muito comumente encontrada nos hospitais de todo o mundo.

Referências:

1 HOWARD, S. J.; HOPWOOD, S.; DAVIES, S.C. Antimicrobial resistance: a global challenge. **Science Translational Medicine** , v.6, n. 236,p.1-2, 2014. doi:10.1126/scitranslmed.3009315. 2 LOCKE, J.B.; ZURENKO, G.E.; SHAW, K.J.; BARTIZAL,I. K Tedizolid for the management of human infections: in vitro characteristics. **Clinical Infections Diseases** .v.58, supl.1, p.35-42., 2014. doi:10.1093/cid/cit616. 3 DABUL, A. N. G. *et al.* Resistance in In vitro selected Tigecycline-resistant Methicillin-resistant staphylococcus aureus sequence type 5 is driven by mutations in mepR and mepA genes. **Microbial Drug Resistance** , v. 24,n. 5,p.519-527, 2018. doi:10.1089/mdr.2017.0279.

110

PG14

Planejamento de candidatos antivirais contra o vírus da febre amarela baseados na estrutura do complexo NS2B-NS3 protease

OLIVEIRA, V. G. F. ; GODOY, A. S. ; NOSKE, G. D. ; OLIVA, G.

gabriela.noske@usp.br

O vírus da febre amarela possui genoma composto por uma única fita de RNA e pertence à família Flaviviridae, que inclui dengue, zika e hepatite C. Apesar do histórico da doença, ainda não existe nenhum medicamento para seu tratamento. No Brasil, a doença se mantinha contida com a vacinação, no entanto, um surto recente entre 2016-2018, recolocou a febre amarela como preocupação de saúde pública, com risco de espalhar-se novamente no ambiente urbano. O genoma viral codifica uma única poli proteína que contém três proteínas estruturais e sete não estruturais. A NS3 tem dois domínios: um domínio protease e um domínio helicase/NTP-ase. A NS3 protease age juntamente com uma outra proteína não estrutural como cofator, a NS2B, que auxilia o enovelamento correto da NS3 protease e permite que tenha uma forma ativa. O complexo NS2B-NS3 protease auxilia na clivagem da poli proteína imatura, liberando as proteínas formadoras do complexo de replicação viral. Considerando a importância deste complexo no ciclo de replicação viral, é evidente que ele representa um importante alvo no planejamento de potenciais candidatos antivirais. Sendo assim, o objetivo principal deste projeto é a elucidação da estrutura cristalográfica do complexo NS2B-NS3 protease da linhagem circulante do vírus da febre amarela e sua utilização na busca por potenciais candidatos antivirais. Inicialmente, amplificamos a região codificante da proteína NS2B-NS3 protease utilizando como molde o cDNA viral, gentilmente cedido pela Dra. Myrna Bonaldo (Fiocruz). (1) A sequência amplificada foi clonada no vetor de expressão pET_SUMO pelo método de clonagem independente de ligação (LIC), seguida da inserção de um linker (G4SG4) entre o cofator NS2B e o domínio protease. A proteina foi purificada e utilizada para cristalização. A coleta de dados foi realizada no Diamond Light Source e a resolução da estrutura feita utilizando o método de substituição molecular. Por fim, avaliamos a atividade da proteína foi realizado um ensaio baseado na fluorescência do AMC liberado pela atividade proteolítica da enzima na presença do substrato Bz-nKRR-AMC. (2) Dos cristais obtidos a partir da proteína purificada, após a coleta dos dados de difração foi possível obter um conjunto de dados que nos possibilitou resolver a estrutura cristalográfica, e assim obtivemos o modelo final da estrutura da NS2B-NS3 protease a 2.9 Å, a qual encontra-se na conformação fechada e ativa. Além disso, a enzima demonstrou elevada atividade proteolítica no ensaio de atividade, condizente com a conformação estrutural obtida, o que nos permitiu padronizar um ensaio de atividade que terá suma importância na busca por inibidores da enzima. Subsequentemente, pretendemos aplicar o método de SBDD, aliado aos ensaios enzimáticos.

Referências:

1 BONALDO, M. C. *et al.* Genome analysis of yellow fever virus of the ongoing outbreak in Brazil reveals polymorphisms. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz** , v. 112, n. 6, p. 447-451, jun. 2017. 2 LI, Y. *et al.* Structural insights into the inhibition of Zika virus NS2B-NS3 protease by a small-molecule inhibitor. **Structure** , v. 26, n. 4, p. 555-564.e3, Apr. 2018.

PG15

Modelo experimental de descontaminação de rins para transplante

MAFUD, L. C. G. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.
lgoenagamafud@ifsc.usp.br

Atualmente, os percentuais de pedidos anuais de transplantes de órgãos estão aumentando e o Brasil não é exceção. Em 2018, a taxa de transplante foi de 2,4% abaixo de 2017, que foi de 16,6 transplantes por milhão de população (pmp). Além disso, os dados fornecidos pela Organ Procurement Organization e Rede de Transplantes afirmam um total de 120.000 pessoas na lista de espera de órgãos, um resultado preocupante e desproporcional entre a demanda de órgãos para transplante e o número de transplantes realizados.(1) Uma das causas desse problema é a contaminação de órgãos por patógenos que muitas vezes são resistentes a antibióticos e não podem ser usados para doação.(2) O objetivo do trabalho é projetar um modelo experimental para descontaminação de rins para transplante em humanos. Para realizar esta pesquisa, um modelo experimental de descontaminação de órgãos é proposto através do uso de técnicas ópticas, incluindo o uso de luz ultravioleta (UV) e/ou inativação fotodinâmica, associadas à perfusão de rins humanos de descarte (não viáveis para transplante humano) ex vivo. A perfusão será realizada a partir de uma adaptação de um sistema comercial de manutenção da viabilidade de rins durante transplantes a um sistema de descontaminação por perfusão que foi desenvolvido em nosso grupo, já testado em pulmões para transplante humano com sucesso.(3) Feita a adaptação, o modelo com rim de descarte ex vivo será investigado para avaliar a capacidade de descontaminação do órgão. Espera-se que, a partir disso, seja possível reduzir a carga microbiana do órgão, de modo a tornar órgãos que seriam descartados viáveis para utilização em transplantes humanos.

Referências:

1 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE TRANSPLANTES. Dimensionamento dos transplantes no Brasil e em cada estado (2011-2018). **Registro Brasileiro de Transplantes RBT** v.24, n.4,p.94,2018. 2 O'NEILL, J. Antimicrobial resistance: tackling a crisis for the health and wealth of nations. **Review on Antimicrobial Resistance** .Dec. 2014. 3 GALASSO, M. *et al.* Inactivating hepatitis C virus in donor lungs using light therapies during normothermic ex vivo lung perfusion. **Nature Communications,** v.10,p.481,2019.doi.org/10.1038/s41467-018-08261.

112

PG16
Studies of Bose-Einstein condensates vortices in bubble traps

BIRAL, E. J. P. ; SANTOS, F. E. A.
eliasbiral@usp.br

Bose-Einstein condensation (BEC) is a state of matter in which all the atoms of the system are in the same quantum state, the lowest energy state. This state of matter starts to exist once a dilute gas of bosons is cooled down to very low temperatures of the order of absolute zero. It was predicted by Albert Einstein when using Bose statistics in the middle of the 1920's but it was only experimentally achieved by Eric Cornell in 1995. In his experiment Cornell was able to obtain a diluted system in ultra-cold temperatures because he was using alkaline gases which have a weak inter-atomic interaction and this achievement gave him the Nobel Prize. Since this date up to now the study of ultracold atoms have become an area of great interest in physics. There has been a great advance in the study of BEC with experimental techniques that physicists made to understand the nature behind this so important phenomenon, e.g. the study of disorder in BEC's, studies of Anderson localization, realization of new exotic systems like quantum droplets etc. One experiment which is of great importance in this work is the bubble trap. One of the ways the bubble can be produced is using a radiofrequency field in an adiabatic potential based on a quadrupolar magnetic trap. This experimental setup allows the production of superfluid currents on a ring shaped geometry both with the creation of persistent currents around the bubble or with the development of nonharmonic confinement in a rotating gas to prevent them from escaping. Either way what we have is a superfluid of BEC with a hole on the interior which characterizes a quantum vortex. Quantum vortices are the cornerstone of the superfluids. They differ from classical vortices because they have a quantized flow. The rotation of the superfluid is characterized by the fact that it's density is zero at a singular point.(1-2) The behavior of vortices in relation to physical parameters still presents challenges in regard to the theoretical description, in special to the case of the BEC on the bubble trap. The main goal of this work is to produce a better theoretical understanding of quantum vortices phenomenon in bubble traps. We plan to use variational analytical methods with the Gross-Pitaevskii's functional in conjunction with real-time three-dimensional long-scale simulations (3) to study these vortices on the bubble trap BEC. In this way, we seek to contribute with a robust theoretical base in a cutting-edge field that maintains significant contact with current experiments.

Referências:

1 SANTOS, F. E. A. Hydrodynamics of vortices in Bose-Einstein condensates: a defect-gauge field approach. **Physical Review A,** v. 94, n.6,p.063633, 2016. 2 TSATSOS, M. C. *et al.* Quantum turbulence in trapped atomic Bose-Einstein condensates. **Physics Reports,** v.622, p.1-52, 2016.doi: 10.1016/j.physrep.2016.02.003 . 3 CIDRIM, A. *et al.* Vortices in self-bound dipolar droplets. **Physical Review A,** v.98, p.023618,2018. doi:10.1103/PhysRevA.98.023618.

113

PG17

Para além de uma linguagem da natureza: a matematização da eletrostática no século XVIII

NARDI, L. M. C. ; SILVA, C. C.
lucas.nardi@usp.br

Estudos bastante completos sobre a história da eletrostática já são conhecidos pelos historiadores da ciência. (1) Além disso, já existem bons trabalhos sobre o papel da matemática na mecânica do século XVIII e XIX (2), da matematização da eletrodinâmica no século XIX, e sobre as consequências da matematização. (3) Entretanto, poucos estudos foram dedicados a matematização da eletrostática no século XVIII. Alguns pensadores abordam esse processo de um ponto de vista epistemológico e histórico, como Gaston Bachelard (1884 - 1962). Para ele, o uso da matemática nas ciências naturais possibilitou a superação de um obstáculo epistemológico, permitindo à física passar de uma metafísica substancialista para uma relacional, dependente da matemática. Contrastando a visão de Bachelard, neste trabalho propomos uma interpretação que destaca a pluralidade do processo de matematização da eletrostática no século XVIII nas obras de Johann Albrecht Euler (1734 - 1800) e Franz Ulrich Theodosius Aepinus (1724 - 1802), que tinham tratamentos epistemologicamente distintos quanto ao uso da matemática em suas teorias sobre os fenômenos eletrostáticos e também pela própria natureza de tais fenômenos. Em Johann, a matemática serve como auxiliar na modelização de casos específicos. Porém, em Aepinus, cuja teoria é baseada na teoria – sem matemática – do fluido elétrico de Benjamin Franklin (1706 - 1790), a matemática é parte fundamental na articulação de hipóteses básicas da teoria. No primeiro, os fenômenos eram explicados por mecanismos de contato. O éter, e em especial o seu movimento, explicavam fenômenos como atração, repulsão e aparecimento de faíscas. Já Aepinus, fortemente influenciado pela teoria de Benjamin Franklin (1706 - 1790) e se apoiando na autoridade dos trabalhos de Isaac Newton (1643 - 1727) em gravitação, não considerava a ação mediada. Para ele, fenômenos como atração e repulsão eram explicados como fenômenos resultantes da ação a distância. Apesar das particularidades deste processo, utilizamos a noção de projeto epistemológico, que abarca diferentes estilos e graus de generalização de matematização. Isso nos permite estabelecer algumas diretrizes que auxiliam na elaboração de questões históricas, como quais eram os critérios do que constituía uma explicação válida e em termos de quais entidades ontológicas essas explicações eram construídas.

Referências:

1 HEILBRON, J. L. **Electricity in the 17th and 18th centuries** . Berkeley: University of California Press, 1979. 2 GARBER, E. **The language of Physics** : the calculus and the development of theoretical physics in Europe, 1750-1914. Boston: Birkäuser, 1999. 3 GINGRAS, Y. What did Mathematics do to Physics? **History of Science** , v. 39, n. 4, p. 383-416, 2001.

PG18

Panorama energético do movimento de domínios em *Staphylococcus aureus* UDP-N-acetilglicosamina 2-epimerase

AZEVEDO, É. C. ; NASCIMENTO, A. S.
erika.chang.azevedo@usp.br

Staphylococcus aureus é uma importante causa de infecções associadas ao sistema de saúde em todo o mundo. (1) Foi demonstrado em diversos trabalhos que a parede de ácidos teicóicos (WTA ou Wall Teichoic Acid) pode apresentar um alvo importante na ação contra células resistentes a antibióticos. (2) A UDP-N-acetilglicosamina (UDP-GlcNac) 2-epimerase de *Staphylococcus aureus* , MnaA (PBD ID: 5ENZ), é uma das primeiras enzimas que compõem a via de biossíntese da WTA. (3) Neste trabalho, simulações de dinâmica molecular detalhadas da proteína MnaA foram utilizadas para caracterizar as mudanças conformacionais que ocorrem na presença de UDP e UDP-GlcNac, bem como o panorama energético associado a essas mudanças. Utilizando diferentes técnicas de simulação, como ABMD e GAMD, foi possível acessar o perfil energético para a proteína com e sem ligantes em seu sítio ativo. Nós encontramos que o movimento da proteína é descrito por um perfil energético dinâmico, o qual tem seu mínimo modificado pela presença dos ligantes, com um estado de conformação fechada sendo mais frequentemente observada no estado ligado, enquanto a proteína em seu estado não ligado favorece uma conformação aberta. Posteriores estudos estruturais indicaram que aminoácidos positivamente carregados associados à interação com o UDP e UDP-GlcNac possuem maior influência sobre o movimento de abertura da enzima. Finalmente, o perfil de energia obtido neste trabalho fornece conclusões importantes para o planejamento de inibidores que que têm como alvo a MnaA.

Referências:

1 ROEMER, T.; SCHNEIDER, T.; PINHO, M. G. Auxiliary factors: a chink in the armor of MRSA resistance to beta-lactam antibiotics. **Current Opinion in Microbiology** , v. 16, n. 5, p. 538-548, 2013. 2 SOBHANIFAR, S. *et al.* Structure and mechanism of Staphylococcus aureus TarM, the wall teichoic acid alpha-glycosyltransferase. **Proceedings of the National Academy of Sciences** v. 112, n. 6, p. E576-585, 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, e1005585, 2016.

115

PG19

Estudo comparativo da compressibilidade isotérmica e da capacidade térmica de um gás de bósons, via dois modelos : variáveis globais e aproximação por densidade local

MARTINS, E. B. ; TELLES, G. D.

ed_uspi1@usp.br

Gases quânticos degenerados apresentam amplas possibilidades de estudos nas mais diversas áreas da física. Em particular, nosso grupo de Física Atômica e Molecular vem se destacando na investigação de turbulência quântica e termodinâmica com variáveis globais, ao longo dos últimos anos. No caso da termodinâmica, realizamos um estudo comparativo, dos resultados, de algumas suscetibilidades termodinâmicas, determinadas via dois modelos: a) o modelo das variáveis globais (1-2), (GV, do inglês), que se baseia na determinação de dois parâmetros conjugados : o volume (γ) e a pressão (), harmônicos e b) o modelo grande canônico de aproximação contínua.(3-4) A capacidade térmica e a compressibilidade isotérmica, foram as suscetibilidades estudadas e comparadas entre os dois modelos . No caso de um condensado típico, a densidade de número n(r), varia espacialmente e, por isso, é dito não homogêneo. Em princípio esperava-se que a termodinâmica clássica não fosse adequada para tratar corretamente os condensados inomogêneos . Surgiu então um modelo baseado em variáveis globais, extendendo o estudo aos de sistemas não-homogêneo.O objetivo principal do projeto é determinar o comportamento térmico das suscetibilidades mencionadas, que foram determinadas de acordo com os dois modelos independentes, procurando analisar as semelhanças e diferenças entre os resultados gerais obtidos para condensados de Bose Einstein.

Referências:

1 ROCHIN,R. ; Vitor : equation of state of an interacting Bose gas confined by a harmonic trap:the role of the "Harmonic" Pressure, **Physical Review Letters** , v.94 , p.130601-1, (2005. 2 ROCHIN,R. BAGNATO, V. S. Thermodynamics of an ideal gas of Bosons harmonically trapped- equation of state and susceptibilities, **Brazilian Journal of Physics**, v.35,p.607, 2005. 3 GROSSMANN, S.; HOLTHAUS,,M.Transition to th e Bose -Einstein condensate , **Zeitschrift Na turforsch**.v.50,p,921-930,1995. 4 PiITAEVSKII, L.; STRINAGARI, S. **Bose-Einstein condensation and superfluidity**. Oxford: Oxford Science Publications, 2016.

PG20

Diversidade de opiniões e bolhas sociais no modelo de Sznajd adaptado

BENATTI, A. ; COSTA, L. F.
alexandre.benatti@usp.br

Entender a maneira pela qual a opinião humana muda ao longo do tempo e do espaço constitui um dos grandes desafios da pesquisa em sistemas complexos. E uma abordagem desenvolvida e usada para estudar a dinâmica de opinião é o modelo de Sznajd. (1) Modelo este que fornece algumas características particularmente interessantes, como a sua simplicidade e capacidade de representar alguns dos mecanismos que se acredita estarem envolvidos na dinâmica de opinião. Nosso trabalho se focou em estudar como esses sistemas tendem a produzir distribuições de estado mais ou menos uniformes. Além disso, também é importante entender como as modificações em tais sistemas, por exemplo aumentando ou reduzindo a interconectividade, podem influenciar a respectiva dinâmica. Para isso desenvolvemos uma abordagem, nomeada Modelo Sznajd Adaptado, em que as mudanças de opinião por um indivíduo (isto é, um nó de rede) implicam em possíveis alterações na topologia da rede. Isso foi feito permitindo que os agentes alterem suas conexões para outros vizinhos com o mesmo estado com uma dada probabilidade. A diversidade é definida com base na teoria da informação, mais especificamente na entropia de Shannon, termos de frequências relativas das opiniões. (2) Assim diversidade foi calculada como a exponencial da entropia da densidade de opiniões. Neste trabalho foi abordado a capacidade da dinâmica em simular bolhas sociais, mostrando que a diversidade pode ser fortemente afetada pela probabilidade de um agente da rede em mudar sua opinião de forma espontânea e que dependendo dos parâmetros usados, os agentes vão terminar conectados apenas aos que concordam com sua opinião resultado esse visto em redes sociais reais. (3)

Referências:

1 SZNAJD-WERON, K.; SZNAJD, J. Opinion evolution in closed community. **International Journal of Modern Physics C** , v. 11, n. 6, p. 1157-1165, 2000. 2 JOST, L. Entropy and diversity. **Oikos** , v. 113, n. 2, p. 363-375, 2006. 3 NIKOLOV, D. *et al*. Measuring online social bubbles. **PeerJ Computer Science** , v. 1, p. e38-1-e38-14, 2015.

117

PG21

Análise evolutiva e estrutural de genes associados ao Diabetes Mellitus tipo 2

MOTA, D. ; DEMARCO, R.
diogomaciel@usp.br

O Diabetes Mellitus Tipo 02 (DM2) é um grupo de doenças metabólicas caracterizadas por hiperglicemia derivada dos defeitos na ação da insulina, e representa entre 90-95% dos casos da doença. (1) Sua manifestação é dependente de alelos mutantes em múltiplos loci gênicos. No momento atual, há pelo menos 128 sinais distintos, de associação ao DM2, atribuídos a 113 loci. (2) Devido à alta prevalência do DM2, argumenta-se que a maioria dessas mutações devem ter possuído um caráter neutro ou positivo durante a evolução da espécie humana. (3) Presentemente, é pouco conhecido o efeito dessas mutações no processo de splicing e de regulação do processo de transcrição dos genes associados e seu impacto na fisiologia humana. Diante disso, no presente projeto sugerimos uma análise baseada em um estudo evolutivo e estrutural dos genes associados ao DM2 com o objetivo de obter evidências sobre a possível tendência dessas mutações se localizarem preferencialmente ao lado de éxons dispensáveis; verificar se genes contendo mutações possuem uma menor conservação do seu perfil de expressão gênica ao longo da evolução dos vertebrados do que a média de genes de perfil de expressão semelhante que não estejam associados ao DM2; e verificar se as posições onde encontram-se as mutações associadas ao DM2 não apresentam mutações recorrentes ao longo da evolução de vertebrados. A análise destes dados permitirá verificar se a alta prevalência de mutações associadas ao DM2 poderia derivar do fato delas afetarem estruturas ou padrões de expressão que seriam naturalmente mais flexíveis e que, portanto, teriam baixo potencial deletério. Em adição, testaremos se a alta prevalência também poderia ser derivada de uma tendência destes sítios sofrerem mutações recorrentes.

Referências:

1 AMERICAN DIABETES ASSOCIATION. Diagnosis and classification of Diabetes mellitus. **Diabetes Care** , v. 37, suppl. 1, p. S81-S90, Jan. 2014. doi: 10.2337/dc14-s081. 2 SCOTT, R. A. *et al.* An expanded genome-wide association study of type 2 diabetes in europeans. **Diabetes** , v. 66, n. 11, p. 2888-2902, Nov. 2017. 3 SÉGUREL, L. *et al.* Positive selection of protective variants for type 2 diabetes from the Neolithic onward: a case study in Central Asia. **European Journal of Human Genetics** , v. 21, n. 10, p. 1146-1151, 2013.

118

PG22
Modeling interacting diseases with different time scales

VENTURA, P. C. ; RODRIGUES, F. A.
paulo.pc.vs@gmail.com

Spreading phenomena such as epidemics, rumors and social behavior often interact with each other. In many cases, the interaction is asymmetrical, meaning that one process enhances the spreading of the other, which in turn impairs the first process. Examples of such kind are the interplay between epidemics and awareness (1), digital malicious worms and worm-killer software, fake news and fact-checking websites, among others. There is a considerable amount of research on modeling interacting epidemic-like spreading processes, but most works are focused on the mutually cooperative or competitive cases. In this work, we study and compare different models for two asymmetrically interacting epidemic processes. Our goal is to determine the influence of the relative time scale between the processes, including thus situations in which each process has its own clock, another feature often neglected on the literature. We currently study two models in the asymmetric case: interacting diseases by susceptibility change (2) (model I), and competing strains with superinfection (3) (model II). In both models, each process is an SIS (Susceptible-Infected-Susceptible) disease model, but the interaction scheme is different for each model. We calculate the phase diagrams in a mean field condition (i.e., assuming homogeneous interactions). We show that the phase diagram of model I does not depend on the relative time scale, whereas model II has a critical curve that is affected by the time scale parameter. We also study the prevalence of the impaired disease, whose behavior with the time scale we found to be different for each model. In model I, the prevalence is always higher when the clock of the impaired disease is slower than that of the favored disease, but the exact opposite behavior is observed in model II. We finally show that damped oscillatory behavior can be observed in both models, but it only occurs in specific regions of the phase diagrams; those regions apparently depend on the time scale parameter in both models. With the results obtained so far, we conclude that the relative time scale plays an important role on the interplay between interacting diseases or other spreading phenomena, and that the behavior of the prevalence with the time scale is not the same for different models. Our findings may improve the understanding of asymmetrically interacting spreading processes, and help future works to deal with the question of different time scales.

Referências:

1 GRANELL, C.; GÓMEZ, S.; ARENAS, A. Competing spreading processes on multiplex networks: awareness and epidemics. **Physical Review E** , v. 90, n. 1, p. 012808-1-012808-7, July 2014. 2 SANZ, J. *et al*. Dynamics of interacting diseases. **Physical Review X** , v. 4, n. 4, p. 041005-1-041005-22, Oct. 2014. 3 WU, Q.; SMALL, M.; LIU, H. Superinfection behaviors on scale-free networks with competing strains. **Journal of Nonlinear Science** , v. 23, n. 1, p. 113-127, Feb. 2013.

119

PG23

Reconstrução do diagrama de fases do modelo de Heisenberg-Kitaev em um campo magnético via ondas de spin não lineares

CÔNSOLI, P. ; ANDRADE, E.

pedro.consoli@usp.br

Em 2006, A. Kitaev propôs um modelo de spins-1/2 com interações anisotrópicas em uma rede favo de mel. (1) Após apresentar a solução exata do problema, Kitaev ainda mostrou que, na presença de um campo magnético pequeno, correntes térmicas livres de dissipação e carregadas por férmions de Majorana surgem nas bordas do material. Este resultado, bem como a posterior constatação de que o estado fundamental do sistema é um exemplo de um líquido de spin quântico, motivou uma busca intensa por um mecanismo físico capaz de reproduzir as características do modelo. Khaliullin e Jackeli então provaram que uma combinação de efeitos de campo cristalino e acoplamento spin-órbita forte torna a interação de Kitaev energeticamente comparável à de Heisenberg em uma classe de isolantes de Mott. (2) Assim, o chamado hamiltoniano de Heisenberg-Kitaev passou a ser tido como um ponto de partida para o estudo de materiais dotados da interação desejada. Uma vez que este modelo mínimo foi devidamente caracterizado, um avanço natural consistiu em investigar sua resposta à aplicação de um campo magnético. Contribuições nesse sentido, entretanto, ainda são frequentemente limitadas a métodos computacionais que simulam sistemas de tamanho reduzido e deixam várias perguntas em aberto. Neste trabalho, estudamos o modelo de Heisenberg-Kitaev sujeito a campo paralelo à direção $[100]$ e analisamos o efeito de flutuações quânticas por meio da teoria de ondas de spin. Começamos com a apresentação dos resultados obtidos em regime linear e, tomando curvas de magnetização como base, discutimos como eles indicam a necessidade de incluir flutuações de ordens superiores. Em seguida, sistematizamos a implementação de cálculos não lineares seguindo os passos de Wollny (3) e mostramos que eles conduzem a modificações substanciais no diagrama de fases do modelo. Por fim, comparamos nossas predições com os resultados de cálculos de diagonalização exata para um sistema de 24 sítios.

Referências:

1 KITAEV, A. Anyons in an exactly solved model and beyond. **Annals of Physics** , v. 321, n. 1, p. 2-111, 2006. 2 JACKELI, G.; KHALIULLIN, G. Mott Insulators in the strong spin-orbit coupling limit: from Heisenberg to a quantum vompass and Kitaev models. **Physical Review Letters** , v. 102, n. 1, p. 017205-1-017205-9, Jan. 2009. 3 WOLLNY, A. **Fractional moments and singular field response** : vacancies in two-dimensional ordered antiferromagnets. 2016. 162 p. PhD Thesis (Doctor of Natural Sciences) - Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften, Technischen Universität Dresden, Dresden, 2016.

120

PG24

Recombination dynamics of Landau levels in an InGaAs/InP quantum well

TAVARES, B. ; PUSEP, Y. ; LAPIERRE, R. R.

belarmino@ifsc.usp.br

Dynamics of differently spin-polarized photoexcited carriers was investigated by the time-resolved photoluminescence (PL) in a system of Landau levels (LL) formed in an InGaAs/InP quantum well. Oscillations of the ground state LL energy caused by the filling factor dependent screening of excitons were observed in both spin-up and spin-down polarizations. The obtained results are evidence of an insignificant spin-flip process in the InGaAs/InP quantum well. Shake-up emission from LLs above the Fermi level was observed and it was found to considerably affect the recombination dynamics of LLs. Particularly, the inter-LL scattering responsible for the shake-up effect manifests itself in a rapid decay of the emission from LLs. PL transients revealed two characteristic times caused by recombination of two groups of photogenerated carriers which recombine independently. The inter-LL scattering is shown to be responsible for the time delay of PL response. The characteristic time about 200 ps of the inter-LL transitions was determined. The sharp minimum of the recombination time was found in the interval of the magnetic field where the transition between the quantum Hall phases with the filling factors =1 and =2 takes place; the recombination time minimum is attributed to the formation of the metallic intermediate phase which causes increasing overlap between the electron and hole wave functions. The main results were published in (1).

Referências:

1 TEODORO, M. D. *et al.* Recombination dynamics of Landau levels in an InGaAs/InP quantum well. **Physical Review B** , v. 98, n. 15, p. 155431-1-155431-7, Oct. 2018.

121

PG25
Organic thin film lasers applied to chemical sensing

OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; OITICICA, P. R. A.
praoiticica@ifsc.usp.br

The interaction of light with organic gain materials in resonant structures provides a mechanism to enhance the sensing capabilities for detection of chemical species, including gases and biomolecules. For any laser to work a set of parameters and conditions must be tuned: excitation threshold, cavity losses, photophysical absorption-emission dynamics, medium refractive index, and matching conditions of feedback in resonant structures. If any of these parameters can be made dependent on the concentration of a desired analyte, we may be able to obtain a very sensitive sensor device. The enhancement of sensing capabilities in laser-based devices has been reported in the literature, for detection of traces of hazardous gases (1) and biomolecules. (2) Organic lasers do not compete with inorganic III-V lasers but organic gain materials are advantageous owing to their broad absorption and emission in the UV-visible spectra. Furthermore, with these organic materials simple fabrication methods can be used with solution processing, and it is possible to tailor the chemical structure for special electronic photophysical properties. Indeed, thin film lasers have been obtained with various resonator architectures and emission wavelength tunability in the visible spectra. (3) Research on electrically-pumped organic laser diodes led to low-threshold devices, possibly pumped by commercial light-emitting diodes (LEDs) under pulsed operation (1), and techniques that turn possible organic lasing in the quasi-Continuous Wave (qCW) regime. (3) The electrically pumped organic laser remains a challenge. Herein, we aim to develop an organic thin film laser pumped by a compact light source such as an LED or laser diode, in addition to demonstrating lab-on-chip (LOC) devices for chemical sensing. The organic laser sensor may be capable to detect traces of toxic gases for environmental monitoring at room temperature and normal ambient conditions.

Referências:

1 WANG, Y. *et al.* LED pumped polymer laser sensor for explosives. **Laser and Photonics Reviews** , v. 7, n. 6, p. L71-L76, 1 Nov. 2013. 2 MCCONNELL, G. *et al.* Organic semiconductor laser platform for the detection of DNA by AgNP plasmonic enhancement. **Langmuir** , v. 34, n. 49, p. 14766-14773, Dec. 2018. 3 CHÉNAIS, S.; FORGET, S. Recent advances in solid-state organic lasers. **Polymer International** , v. 61, n. 3, p. 390-406, Mar. 2012.

122

PG26
QCD perturbativa em ordens altas no decaimento H→bb¯

LONDON, C. Y. M. ; BOITO, D. R.
cristiane.london@usp.br

Na ausência de observação direta de física além do modelo padrão no LHC, uma maneira de se procurá-la é através da física de precisão. No caso do Higgs, a determinação precisa de seu acoplamento com outras partículas do modelo padrão pode revelar nova física. Como os resultados experimentais estão ficando cada vez mais precisos, é necessário então aprimorar as previsões teóricas. A largura de decaimento do bóson de Higgs é amplamente dominada pelo canal dos quarks bottom, sendo ela conhecida até quarta ordem no acoplamento forte, α_s.(1) Neste trabalho, utilizando o conhecimento dos renormalons da série perturbativa e o método dos aproximantes de Padé (2), iremos estudar os termos de ordem superior da série perturbativa em α_s para este processo. Primeiro iremos testar o método no chamado limite de large-β_0 da QCD (que essencialmente parte da ideia de que os termos proporcionais ao número de sabores são dominantes), onde a séria perturbativa da largura de decaimento é conhecida em todas as ordens.(3) Depois iremos aplicá-lo para o caso da QCD. O objetivo é prever com rigor essas contribuições e assim obter de maneira confiável o erro devido ao truncamento da série perturbativa, contribuindo para o conhecimento preciso da largura de decaimento do Higgs em quarks bottom no modelo padrão.

Referências:

1 HERZOG, F. *et al.* On Higgs decays to hadrons and the R-ratio at N4LO. **Journal of High Energy Physics** , v.1708, p.113, 2017.doi.org/10.1007/JHEP08(2017)113. 2 BOITO, D.; MASJUAN, P.; OLIANI, F. Higher-order QCD corrections to hadronic decays from Padé approximants. **Journal of High Energy Physics,** v.1808,p. 075,2018.doi.org/10.1007/JHEP08(2018)075. 3 JAMIN, M.; MIRAVITLLAS, R. Scalar correlator, Higgs decay into quarks, and scheme variations of the QCD coupling. **Journal of High Energy Physics,** v. 1610, p.059 2016.doi.org/10.1007/JHEP10(2016)059.

123

PG27

Estudo da atividade fotocatalítica de nanocubos de SrTiO3 em suspenção para a produção de hidrogênio solar

CENTURION, H. A. ; GONÇALVES, R. V.

higorcenturion@usp.br

Combustíveis fosseis, por décadas vem sendo a principal fonte energética para impulsionar o nosso desenvolvimento tecnológico e social, contudo, existem grandes problemas intrínsecos a esta matriz energética, como esgotamento de suas reservas, mudanças climáticas e emissão de gases de efeito estufa. Diante desta alarmante situação, o hidrogênio, obtido por meio da quebra da molécula de água, por um mecanismo conhecido como fotossíntese artificial, é um importante candidato para contornar os problemas associados ao uso deste combustível.(1) Dentre os possíveis materiais que podem ser empregados neste processo, podemos destacar o SrTiO3 (STO), devido a sua estabilidade química, abundância dos elementos que compõe este material e a sua estrutura de bandas, que está posicionada de modo a propiciar a quebra da água em H2 e O2 de forma stequiométrica. Embora o STO tenha excelentes propriedades no que tange aos requisitos da fotossíntese artificial, é preciso destacar que existem ainda grandes desafios no emprego deste semicondutor, uma vez que seu elevado bandgap (3.2 eV) limita a sua atividade fotocatalítica a região do ultravioleta, que corresponde a apenas 3% do espectro solar e em adição, também possui elevada taxa de recombinação do par elétron-buraco, reduzindo drasticamente sua eficiência fotocatalítica.(1-2) Sendo assim, este trabalho busca desenvolver estratégias para otimizar o processo de quebra da molécula de água, utilizando um sistema de suspenção de nanocubos de STO em meio aquoso A síntese do STO ocorreu pelo método de fluxo (3), sendo empregado o SrCO3, TiO2 e o SrCl2.6H2O como precursores na síntese deste material. A estrutura cristalina deste material foi investigada por meio da Difração de Raios X (DRX) e Espectroscopia Raman, enquanto a morfologia foi observada com o auxílio da microscopia eletrônica de varredura (MEV), as propriedades químicas superficiais foram investigadas com o auxílio da Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios X (XPS) e por fim, a estrutura eletrônica foi estudada com o auxílio da espectroscopia UV-Vis.

Referências:

1 GONÇALVES,R. V. *et al.* Photocatalytic water splitting by suspended semiconductor particles. *In*: SOUZA, F. L.; LEITE, E. R. (eds.) **Nanoenergy.** Switzerland: Springer International Publishing, 2018.p. 107–140. 2 MELO, A. *et al.* Surface photovoltage measurements on a particle tandem photocatalyst for overall water splitting. **Nano Letters,** v. 18, n. 2, p. 805–810, 2018. 3 ZHAO, E. J. *et al.* Aluminum enhances photochemical charge separation in strontium titanate nanocrystal photocatalysts for overall water splitting. **Journal Materials of Chemistry A,** v.6, n. 33, p.16170–16176, 2018.

124

PG28
Modelando brainstorming com sistemas quadro-negro

SALHANI, J. A. S. ; FONTANARI, J. F.
jorge.salhani@usp.br

A todo momento somos expostos a situações-problema que demandam uma determinada solução ótima, que pode ser encontrada de formas distintas quando pensada por apenas um indivíduo ou por um grupo de pessoas. A solução ótima pode não ser clara nas situações sociais que vivenciamos diariamente, porém podemos compreender como o pensamento individual e o coletivo alteram nossa capacidade de resolver tais problemas. Em estudos recentes em psicologia de grupos (1), foram encontradas evidências de que existem distinções entre as performances individual e coletiva na resolução de problemas, mas não somente; em grupos, a inteligência individual não representa fator considerável na performance coletiva quando comparado a outros fatores, tais como equidade de discurso e sensibilidade social de membros participantes, por exemplo. Neste estudo buscamos estender o conceito de inteligência de grupos humanos para agentes virtuais através do modelo quadro-negro (2) (onde um grupo deve apresentar a solução para um problema matemático e todo indivíduo acrescenta informações pertinentes em um banco de dados - quadro-negro - que pode ser acessado por todo o grupo, simulando assim um ambiente onde é possível a troca de informação entre agentes) para que possamos compreender como traços de personalidade individuais alteram a performance do todo.

Referências:

1 WOOLEY, A. W. *et al.* Evidence for a collective intelligence factor in the performance of human groups. **Science** , v. 330, p. 686-688, Oct. 2010. doi: 10.1126/science.1193147. 2 FONTANARI, J. F. Reputation blackboard systems. **Cognitive Systems Research** , v. 50, p. 29-35, Aug. 2018. doi: 10.1016/j.cogsys.2018.03.008.

125

PG29

Inativação fotodinâmica da pneumonia bacteriana utilizando nebulização do fotossensibilizador e iluminação extracorpórea

KASSAB, G. ; TOVAR, J. S. D. ; SILVA, S. S. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.
giulia.kassab@usp.br

A pneumonia é uma das principais causas de morte no mundo, especialmente em menores de 5 anos e maiores de 60, e é causada majoritariamente por bactérias. Diante da dificuldade em desenvolver e aprovar novos antibióticos, e da velocidade na qual surgem cepas resistentes a eles, se faz necessária a busca por tratamentos eficazes, seguros, e que não gerem resistência microbiana. A inativação fotodinâmica (IFD) de micro-organismos se apresenta como uma excelente alternativa, já que desde sua descoberta em 1900 não foram descritas observações de desenvolvimento de resistência a ela. Desde 2013, o nosso grupo de pesquisa estuda a aplicabilidade da IFD no tratamento da pneumonia bacteriana, utilizando o fotossensibilizador indocianina verde (ICV) e ativação extracorpórea com luz infravermelha. Até agora, já demonstramos o princípio *in vitro* e em modelo murino, e estabelecemos um método de entrega da ICV diretamente aos pulmões que é adequado para uso em pacientes. (1-3) Este projeto se propõe a dar os próximos passos necessários para que este protocolo se torne um tratamento clínico. Isso será feito pela otimização dos parâmetros no modelo murino, a validação no modelo porcino e, se possível, o primeiro caso clínico. O trabalho deverá ter grande impacto científico e social.

Referências:

1 LEITE, I.S. *et al.* Near-infrared photodynamic inactivation of S. pneumoniae and its interaction with RAW 264.7 macrophages. **Journal of Biophotonics** , v. 11, n. 1, p. e201600283-1-e201600283-9, Jan. 2018. 2 GERALDE, M.C. *et al.* Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumination [U+2010] an experimental model. **Physiological Reports** , v. 5, n. 5, p. e13190-1-e13190-7, Mar. 2017. 3 KASSAB, G. *et al.* Nebulization as a tool for photosensitizer delivery to the respiratory tract. **Journal of Biophotonics** , v. 12, n. 4, p. e201800189-1-e201800189-9, Apr. 2019.

126

PG30

On the impact of ionic specie in organic electrochemical transistor

COLUCCI, R. ; FARIA, G. C.

rcolucci@usp.br

The biggest challenge in bioelectronics is to produce devices that are able to transduce ionic fluxes from living system into electronic signals, with good signal-to-noise ratio. The device of choice that has shown great success as mixed ionic-electronic translator is the organic electrochemical transistor (OECT). (1) Such device support both ionic and electronic transport with similar efficiency due to the morphological characteristics of organic materials. Besides that, OECTs can be made flexible, are bio-compatible, operates with low-voltages and has relatively fast response. However, most of the biological application of OECTs as biosensors requires some sort of ionic selectivity. Currently, selection of specific ionic species is done by functionalizing the OECT with selectivity membranes. However, the process is time consuming, expensive and not always effective. To overcome this issue, we have studied the electrical, electrochemical as well as swelling response of OECT when it operates in contact with electrolyte with different ions. Our results indicate that the ionic specie in the electrolyte has a strongly influence in the OECT performance. Both volumetric capacitance (C *) and time response () were strongly influenced by the type of ionic specie used. To put it into perspective, C* has increased more the 40 % when using MgCl2 as opposed to NH4Cl. Our results are leading to a more depth understanding of the interaction ion-polymer matrixes and we are currently working on new methodology of data processing that allow the separation of signal contribution of different ionic species in the same electrolyte. Besides, our results can be further used as guidelines to build more efficient devices, simply by choosing the correct ionic specie to be sensed.

Referências:

1 RIVNAY, J. *et al.* High-performance transistors for bioelectronics through tuning of channel thickness. **Science Advances** , v. 1, n. 4, p. e1400251-1-e1400251-5, May 2015.

127

PG31

Avaliação da radiação UV na descontaminação de órgãos para transplante em modelo animal

GÁMEZ, Y. M. ; VOLLET FILHO, J. D. ; MAYUMI, N. I. ; BAGNATO, V. S. ; KURACHI, C.
ymatosg31@gmail.com

A necessidade de transplante de órgãos se incrementa no mundo de forma crescente por diversas causas: aumento de doenças tais como câncer, hipertensão arterial, diabetes mellitus, cirrose hepática, cardiopatias, leucemias, doenças congênitas, entre outras, que tornam impossível o bom funcionamento de órgãos vitais. Nestes casos, o transplante de órgãos pode ser a única esperança de vida e oportunidade de recomeço para pessoas que precisam de doação. Atualmente, o Brasil tem mais de 30.000 pacientes cadastrados na lista de espera para transplantes de órgãos e o número de órgãos disponíveis é insuficiente.(1) Uma das causas que impedem o transplante do órgão é sua infecção por microrganismos patogênicos cada vez mais resistentes aos antibióticos.(2) Uma modalidade terapêutica promissora para a inativação de micro-organismos patogênicos é a radiação UV. (3) Neste estudo se propõe a avaliação da radiação ultravioleta como alternativa para a descontaminação de órgãos para transplantes infectados por microrganismos patogênicos, apresentando um potencial relevante para elevar a disponibilidade de órgãos para transplante. O objetivo principal é avaliar a viabilidade da radiação ultravioleta para a descontaminação de fígado para transplante em ratos.

Referências:

1ASSOCIAÇAO BRASILEIRA DE TRANSPLANTES DE ORGAOS. Dimensionamento dos Transplantes no Brasil e em cda estado (2011-2018). **Registro Brasileiro de Transplantes (RBT),** v.24, n.4, p. 94, 2018. 2 CARLOS, C.;LAURA, L.;GERMAN, B.;ASUNCION, M. Multidrug- resistant bacterial infection in solid organ trasplant cipients. **Enfermedades Infecciosas y Microbiologia Clinica** . v.30, supl 2, p. 40-48, 2012.doi: 10.1016/S0213-005X(12)70081-2. 3 BOUNANNO, M. *et al.* 207 nm UV light- a promising tool for safe low-cost reduction of surgical site infections. I: in vitro studies. **PloS One** , v. 8, n. 10, p. 1-7, 2013.

128

PG32

Electronic properties of two-dimensional transition metal dichalcogenides based on Fe-, Co-, Ni-, Cu-groups and their van der Waals heterostructures

BESSE, R. ; LIMA, M. P. ; SILVA, J. L. F.

rafael.besse@usp.br

Two dimensional (2D) transition metal dichalcogenides (TMDs), compounds with chemical composition MQ_2, where M is a transition metal, and Q = S, Se, Te, are promising materials for applications in photovoltaic devices, mainly due to their tunable band gaps, strong light-matter interaction, and the potential to design van der Waals (vdW) heterostructures through the stacking of different layers. (1) Therefore, a comprehensive understanding of the electronic properties of these materials and their heterostructures, such as band gaps and band alignments (2), encompassing their wide range of compositions, is an important step for the development of novel heterojunctions based on 2D TMDs for solar energy harvesting. TMDs from Ti-, V-, and Cr-groups are commonly obtained in layered crystal structures and therefore the properties of 2D materials based on these compounds have been widely explored. (3) However, diverse structural phases are known for TMDs based on the remaining transition metals, and the investigation of the physical and chemical properties of 2D TMDs from Fe-, Co-, Ni-, and Cu-groups has been restricted. Therefore, in order to contribute to the understanding of their electronic properties, we performed an investigation of 36 MQ_2 compositions (M = Fe, Co, Ni, Cu, Ru, Rh, Pd, Ag, Os, Ir, Pt, Au; Q = S, Se, Te), by means of density functional theory calculations. We employed semi-local (GGA-PBE) and hybrid (HSE06) exchange-correlation functionals, using the vdW corrections of the D3 formulation, and our simulations were performed with the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP). For each composition, lowest energy crystal structures were selected among a set of layered phases and a set of and non-layered phases, both resulting from 11 crystal structures previously experimentally reported for TMDs. The electronic band gaps of the selected crystal structures in their equilibrium geometries were screened, and 17 semiconductors were identified among the monolayers, all from the Fe- and Ni-groups. The conduction and valence band offsets of these monolayers were obtained, and we found that the trends can be explained based on the changes on the M-d and Q-p energy levels and on the variations of bond lengths. We applied the Anderson rule to classify the heterojunctions formed with the semiconductor monolayers, which mainly fall in the type-II classification, and type-I junctions are more common when Ni-group monolayers are used. To further screen the potential of these 2D TMDs for photovoltaics applications, the power conversion efficiencies of solar cells based on the identified type-II heterostructures were estimated, and we obtained values that are comparable to and higher than those that can be estimated for the widely studied junctions of Mo- and W-based TMDs. R. Besse acknowledges financial support from Grant 2017/09077-7, São Paulo Research Foundation (FAPESP).

Referências:

1 LI, C. *et al.* Engineering graphene and TMDs van der Waals heterostructures for photovoltaic and photoelectrochemical solar energy conversion. **Chemical Society Reviews** , v. 47, n. 13, p. 4981-5037, 2018. 2 LINGHU, J. *et al.* High-throughput computational screening of vertical 2D van der Waals heterostructures for high-efficiency excitonic solar cells. **ACS Applied Materials and Interfaces** , v. 10, n. 38, p. 32142-32150, 2018. 3 BASTOS, C. M. O. *et al.* Ab initio investigation of structural stability and exfoliation energies in transition metal dichalcogenides based on Ti-, V-, and Mo-group

elements. **Physical Review Materials** , v. 3, n. 4, p. 044002-1-044002-10, Apr. 2019.

130

PG33

Investigation of superfluid properties in a quantum degenerate mixture of sodium and potassium: implementation of feshbach resonances

MAZO, P. ; GUTIERREZ, E. M. ; SALCEDO, E. G. I. ; CASTILHO, P. C. M. ; TAVARES, P. E. S. ; OLIVEIRA, G. A. ; AUGUSTO NETO, G. ; SCARPIN, J. A. ; FARIAS, K. M.

pedrolmazo@gmail.com

The objective of our global project is to produce a Bose-Einstein Condensate (BEC) of two bosonic species (Sodium23 and Potassium41-39) with the possibility to vary the interspecies interaction for the study of the superfluid aspects in different regimes.(1)Both species are loaded separately in 2D Magneto-Optical Traps (2D MOT) and then pushed to the main chamber and captured in a 3D MOT where further cooling processes can take place and we can finally transfer the cloud to a pure optical trap where we obtain a quantum degenerate mixture.(1)Through the use of techniques as Stirring Beam and Feshbach Resonances (2) will be possible the study of the nucleation of vortices in a two species BEC with tunable interactions, exploring the different miscibility regimes between Na and K, as well as formation and studies in Quantum Turbulence. In this work we focus on the implementation and tuning of the Feshbach Resonances between species: utilizing an homogeneous magnetic field we can change the sign and the magnitude of the interactions in our system. For the magnetic field we will use the quadrupole coils from the magnetic trap, switching it from Anti-Helmholtz to Helmholtz configuration through an H-bridge. (3)This way we can generate a magnetic field up to 700 Gauss in the region of the atoms. We will discuss in this presentation the state of the art of the experimental setup and control system to implement it. The measurement of the resonances is still missing in the literature for 23Na-41K.

Referências:

1 CASTILHO, P. C. M. *et al*. A compact experimental machine for studying tunable Bose–Bose superfluid mixtures. **Laser Physics Letters** v.16, n.3, p.035501,2019. 2 CHIN, C. *et al*. Feshbach resonances in ultracold gases **Reviews of Modern Physics**, v.82, n.2, p.1225,2010. 3 CORDOVA, C. R. C. **Quantum liquids droplets in a mixture of Bose-Einstein condensates** . 2018.247p. (PhD thesis). - The Institute of Photonic Sciences; Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona,2018.

131

PG34

Deposição de materiais metálicos em pó a laser baseado em controle por visão computacional e aprendizagem de máquina

SOUZA, M. A. A. ; CASTRO NETO, J. C.

marcosouza@alumni.usp.br

O emprego de lasers no processamento de materiais vem despertando o interesse ante as promissoras e inovadoras aplicabilidades desta tecnologia. Neste contexto, o processo de deposição de materiais metálicos em forma de pó em superfícies de interesse mediante fusão a laser ou simplesmente Laser Cladding, como é mais conhecido, tem recebido um papel de destaque, principalmente pela sua versatilidade de aplicações no campo da Fabricação Aditiva a Laser.(1) O procedimento permite, como exemplo, tratar e recuperar superfícies metálicas dos mais variados tipos, processo este de grande interesse para diversos ramos da indústria que o utilizam com o intuito de prevenir desgastes ou reparar superfícies danificadas de componentes ou partes mecânicas. No entanto, fatores de extrema importância relativos à utilização desta técnica são o controle preciso e os custos envolvidos no processo, cruciais para lograr os resultados esperados.(2) Sob tal perspectiva, este trabalho apresenta a adoção de um controle inteligente para o sistema baseado em algoritmos de visão computacional e aprendizagem de máquina, capazes de avaliar as superfícies a serem trabalhadas visando aplicações customizadas. Imagens capturadas da superfície são processadas pelo sistema conduzindo à identificação de determinados padrões (trincas, formas, desenhos, depressões, rugosidades, protuberâncias, etc.) direcionando o processo de deposição conforme tais peculiaridades e as necessidades requeridas. Foi implementado um sistema de bancada baseado em mecanismo de coordenadas XYZ que integra os sistemas de pulverização de pó, elétrico, óptico e computacional, além de uma fonte comercial de raio laser infravermelho. Análises por inspeção visual direta e microscopia óptica em amostras de superfícies depositadas com ligas metálicas em pó compatíveis com o substrato demonstram o potencial da aplicação desenvolvida.

Referências:

1 GU, D. **Laser additive manufacturing of high-performance materials** . Berlin: Springer-Verlag, 2015. 2 TOYSERKANI, E.; KHAJEPOUR, A.; CORBIN, S. **Laser cladding** . Boca Raton: CRC Press, 2000.

132

PG35

Two photon absorption of several amino-styryl purines for application in fluorescent probes and biological imaging

COCCA, L. Z. ; PIGUEL, S. ; BONI, L.
leandro.cocca@yahoo.com.br

Organics fluorescent molecules has received great notoriety in last decades due to the wide application range, in specific, purines molecules have photophysical properties, such as high fluorescence quantum yield and considerable Stokes shift, which make them good candidates for applications as fluorescent probes, DNA detection and biological imaging of live cells.(1) Furthermore, push-pull structures can be added in main purine structure, this fact can modify the spectroscopy properties of purines, increasing fluorescence quantum yields and Stokes shift. The determination of two photon absorption (2PA) spectrum is important in view of the applications already mentioned, imaging of cells or fluorescent probes through 2PA can present great advantages over the one photon absorption (1PA). It is due to the ease of filtering between signal and noise and depth of penetration, characteristics of 2PA. Here, we characterized, using linear and nonlinear spectroscopy, nine amino-styryl purines distinguished by distinct push-pull structures. Fluorescence life times, fluorescence quantum yield, permanent and transition dipole moments and molar absorptivity (1PA) were determined through linear optics techniques. 2PA spectra were determined using Z-scan technique.(2) The results showed that changes of push-pull structures modify fluorescence quantum yield and absorption wavelengths windows for 1PA and 2PA. However, fluorescence life time is not suffering considerably modification by changing the push-pull groups. Lastly, 2PA spectra have a shift on the maximum absorption, which varies according to the push-pull structure added to the purine structure, around 750 nm covering the therapeutic window.

Referências:

1 VABRE, R. *et al.* Synthesis and evaluation of spectroscopic properties of newly synthesized push-pull 6-amino-8-styryl purines. **Dyes and Pigments** , v.105, p.145-151, 2014.doi: 1.1016/j.dyepig.2014.01.025. 2 SHEIK-BAHAE, M. *et al.* Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **Journal of Quantum Electronics** ,v. 26, n.4,p.760-769, 1990.

133

PG36

A high throughput, inexpensive and open-source biorreactor for optimization of recombinant protein expression

STELMATCHUK, L. ; THIEMANN, O. H.
laure@usp.br

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. 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. (1) The prototype developed will be capable of monitoring and adjusting bacterial culture conditions such as temperature, pH, oxygenation, and cell growth (A600) of a customized number of small volume samples. (2) 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. 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.

Referências:

1 WITTBRODT, B. T. *et al.* Life-cycle economic analysis of distributed manufacturing with open-source 3-D printers. **Mechatronics** , v. 23, n. 6, p. 713-726, Sept. 2013. 2 DUETZ, W. A. Microtiter plates as mini-bioreactors: miniaturization of fermentation methods. **Trends in Microbiology** , v. 15, n. 10, p. 469-475, Oct. 2007.

134

PG37

Descelularização de traqueia suína utilizando equipamento multifuncional

MION, W. ; SOUZA, A. V. G. S. M. ; DEFFUNE, E. D. ; BAGNATO, V. S. ; GUIMARÃES, F. E. G. G.
wonermion@ifsc.usp.br

Problemas traqueais oriundos de estenoses adquiridas, congênitas, processos traumáticos, câncer e infecção continuam sendo um grande problema para medicina.(1)A produção de órgãos descelularizados e recelularizados por técnicas de bioengenharia de tecidos vêm crescendo como uma tentativa de solucionar esta problemática(2)No entanto, a produção de órgãos descelularizados envolve um processo laborioso, por suas múltiplas etapas complexas, de alto custo, além de apresentarem resultados divergentes de reprodutibilidade na literatura. O objetivo deste doutorado foi elaborar um equipamento multifuncional para realização das multi-etapas no processo de descelularização com intuito de garantir um scaffold com padrões de qualidade aceitáveis e de reprodutividade, quanto as características mecânicas e físico-químicas (3)A elaboração do protótipo foi concluída. Os testes iniciais se mostraram promissores. As amostras descelularizadas apresentaram redução de 80% na concentração de DNA quando comparadas com amostras controles. Na análise da concentração de colágeno por Microscopia Confocal e histologia a traqueia descelularizada apresentou colágeno integro sem alterações significativas em relação ao controle. Não obstante, os testes de força tensil apresentaram queda significativa de 25% quando comparados os grupos descelularizados e controle. Os resultados preliminares mostraram-se eficaz em relação a remoção das células sem danificar o arcabouço, fator importante e indispensável para obtenção do scaffold para posterior implante celular. A queda de força tensil, apesar de significativa, é aguardada, pois a retirada de células e a ação de agentes químicos diminuem a resistência do tecido biológico. Novos protocolos serão testados a fim de melhorar a relação da força tensil.

Referências:

1 BAIGUERA, S. *et al.* Dynamic decellularization and cross-linking of rat tracheal matrix. **Biomaterials** , v. 35, n. 24, p. 6344–6350, 2014. 2 BAIGUERA, S. *et al.* Tissue engineered human tracheas for in vivo implantation. **Biomaterials** , v. 31, n. 34, p. 8931–8938, 2010. 3 HAAG, J. *et al.* Biomechanical and angiogenic properties of tissue-engineered Rat Trachea using Genipin crosslLinked decellularized tissue. **Biomaterials** , v. 33, n. 3, p. 780–789, 2012.

135

PG38

Análise do filme lacrimal utilizando topografia de córnea e visão computacional

OLIVEIRA, L. O. ; CASTRO NETO, J. C. ; OLIVEIRA, A. O.
lorlandi@usp.br

O filme lacrimal é um líquido produzido por um conjunto de glândulas e células e suas funções são a nutrição ocular, a proteção contra microrganismos e a lubrificação do olho. A disfunção na produção do filme lacrimal, conhecida como Síndrome da Disfunção Lacrimal (SDL), é considerada muito comum entre os problemas relacionados ao olho(1) e pode levar à evaporação precoce da lágrima, causando diversos sintomas, como sensação de corpo estranho nos olhos e irritação ocular. A utilização da topografia de córnea é uma técnica não-invasiva capaz de avaliar a qualidade do filme lacrimal, por meio da análise das distorções no padrão do disco de Plácido que é projetado sobre o olho do paciente.(2) Para avaliar o método proposto, pretende-se realizar o exame em dois grupos de pacientes reais: grupo controle e grupo que possui o diagnóstico de SDL. Dessa forma, com o auxílio de um médico oftalmologista, será possível validar o método.

Referências:

1 TSUBOTA, K. Tear dynamics and dry eye. **Progress in Retinal and Eye Research** , v.17, n.4, p.565-596,1998. 2 ALONSO-CARNEIRO, D. *et al*. Diagnosing dry eye with dynamic-area high-speed videokeratoscopy. **Journal of Biomedical Optics** , v.16, n.7, p.076012, 2011.

136

PG39
Geometria da Informação

MAGNO, G. F. ; SOARES-PINTO, D.
gabriel.magno@usp.br

Geometria da informação promove uma investigação das estruturas geométricas da variedade das distribuições de probabilidade, fornecendo uma série de elucidações e resultados aplicáveis a várias áreas que vão desde ciências da informação até ciências físicas, e problemas como os de inferência estatística. Aqui, vamos mostrar os trabalhos desenvolvidos por Amari (1) no contexto de probabilidade clássica na derivação das α-conexões da métrica de Fisher através de f-divergências globalmente definidas. Queremos então relacionar este resultado com as métricas monotônicas sob ação de mapas CPTP vindas do Teorema de Morozova-Chentsov-Petz para o espaço finito de estados quânticos. (2) Por fim, mostrar uma aplicação do uso de técnicas de geometria em espaços quânticos para calcular correções de ordem superior na cota inferior de Cramér-Rao para um estimador de um parãmetro de interesse, observando suas intersecções com os trabalhos anteriormente apresentados. (3)

Referências:

1 AMARI, S.; NAGAOKA, H. **Methods of information geometry.** London: American Mathematical Society 2007. (Translations of Mathematical Monographs, v. 191). 2 PETZ, D. Monotone metrics on matrix spaces. **Linear algebra and its applications** , v. 244, p. 81-96, Sept. 1996. doi: 10.1016/0024-3795(94)00211-8. 3 BRODY, D. C.; HUGHSTON, L. P. Geometry of quantum statistical inference. **Physical Review Letters** , v. 77, n. 14, p. 2851-2854, Sept. 1996.

137

PG40

Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos em regime turbulento

SMAIRA, A. F. ; TELLES, G. D. ; BAGNATO, V. S.
andre.smaira@usp.br

Neste trabalho apresentamos e discutimos os resultados e propriedades de turbulência em condensados de Bose-Einstein determinadas a partir de imagens de tempo de voo e processadas usando algoritmos complexos capazes de extrair informações relevantes das flutuações de densidade atômica observadas nesse tipo de amostra. Baseando-nos em processamento avançado somos capazes de ir além dos resultados padrões, já apresentados, e determinar mapas de momentum linear (1), flutuações de densidade e correlações, propriedades de vórtices, assim como desenvolver outros tipos de análise, para ajudar em uma melhor caracterização e entendimento dos resultados obtidos em regime turbulento, além de outras propriedades relacionadas. Nesse sentido, desenvolvemos uma biblioteca de processamento especializada para ser usada nas análises e na determinação de propriedades não triviais, essenciais ao futuro da pesquisa de gases turbulentos degenerados no IFSC. Nosso foco principal nessa fase final é a reconstrução tridimensional de uma nuvem atômica partindo de duas ou três imagens não ortogonais de absorção capturadas em tempo de vôo. Para isso usamos a "transformada inversa de Radon (2) (princípio da tomografia computadorizada) tridimensional", porém, ao contrário do que exige o teorema da indeterminação, que estabelece que a quantidade de imagens necessárias seja suficientemente grande, temos poucas imagens. Tal problema é amenizado, mas não solucionado, usando métodos de correções iterativas. (3)

Referências:

1 TAVARES, P. E. S. **Excitations in Bose-Einstein condensates**: collective modes, quantum turbulence and matter wave statistics . 2016. 134 p. Thesis (Doctorate in Science) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016. 2 DE PIERRO, A. R. Problemas matemáticos em tomografia por emissão. **Matemática Universitária** , n. 41, p. 33-49, dez. 2006. 3 MIQUELES, E. X., DE PIERRO, A. R. Iterative reconstruction in x-ray fluorescence tomography based on Radon inversion. **IEEE Transactions on Medical Imaging** , v. 30, n. 2, p. 438-450, Feb. 2011.

138

PG41

Collective effects in an ultracold dilute cloud of two-level atoms driven by a scalar light

SANTO, T. S. E. ; BACHELARD, R.

tiagosantiago@usp.br

The interaction of light with cold atoms (1) have been a object of great interest and the cooperative scattering of light gives clues of the rich many body-physics effects. Since Dicke's work on coherence in the spontaneous emission (2) super and subradiance have been studied both from the theoretical and experimental side. These effects relation with lamb shift, single photon sub and superradiance and the superradiance relation with the radiation pressure force have been described. The long-range (1/r) light mediated effective coupling between atoms leads to many-body cooperative effects, even on the dilute regime, creating new lifetimes that can be applied to storing information and to a fast read out of the data. While this cooperative effects are well described in the classical linear optics limit, in which the saturation parameter $s = 2^2/(^2 + 4\Delta^2)$ is very small s « 1, little is known in the quantum saturated regime s » 1. In a recent work the role of the quantum correlations in the fluorescence power spectrum was discussed. (3) We study the dynamics of the intensity of the fluorescence field after a switch-on of the laser beam with the system in the ground state. We show that the collective effects of superradiance and frequency shift are present in the classical dipole model and that the mean-field approach goes beyond the linear optics regime.

Referências:

1 GUERIN, W.; ROUABAH, M. T.; KAISER, R. Light interacting with atomic ensembles: collective, cooperative and mesoscopic effects. **Journal of Modern Optics** , v. 64, n. 9, p. 895-907, 2017. 2 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review** , v. 93, n. 1, p. 99-110, 1954. 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, May 2017.

PG42

Random laser mode dynamics in flexible polymeric nanofibers via Pearson's correlation mapping

SCIUTI, L. ; MERCANTE, L. ; TOMAZIO, N. ; MENDONÇA, C. ; CORRÊA, D. ; BONI, L.
lfsciuti@gmail.com

Random lasers are systems that combines scattering and fluorescence effects to produce laser light.(1) Depending on the random laser emission features, those systems are classified as coherent or incoherent random lasers.(2) In this work, we produced Rhodamine B (RhB)-doped PMMA nanofibers via electrospinning technique. The samples RhB concentrations were 1% and 5% (m/m). The random laser action of the nanofibers were measured with a Nd:YAG frequency doubled emitting at 532 nm with 100 ps pulse duration and 10 Hz repetition rate. The scattering effect is provided by the randomly distributed nanofibers, which presents average fiber diameter of about 480 nm, measured via MEV imaging. The 5% and 1% (m/m) samples showed random laser action with energy threshold of about 1 and 2.5 μJ/pulse, respectively. In addition, for the 5% sample, it was observed incoherent and coherent random laser emission depending on the place the sample is excited. Concerning the mode competition dynamics, it was employed the Pearson correlation method in a set of emission spectra obtained by pumping the sample with same excitation energy and sample position and acquiring a emission spectra each excitation pump. For monitor those spectra, we used the Pearson correlation coefficient of the emission intensities for every pair of wavelength in a subset of the emission spectra. This method results in intensity correlation maps. By comparing those maps, we could characterize random laser emission line widening and blue or redshift for the incoherent emission. In addition, for the coherent random laser, it was possible to monitor the lasing modes competition as function of time.

Referências:

1 WIESRMA, D. S. The physics and applications of random lasers. **Nature Physics** v. 4, p.359–367,2008.doi:10.1038/nphys971. 2 CAO, H. *et al*. Random laser action in semiconductor powder. **Physical Review Letters,** v.82, p.2278–2281, 1999.doi:10.1103/PhysRevLett.82.2278.

PG43
Second order optical nonlinearities in chalcones

MANOEL, D. S. ; GONÇALVES, P. J. ; BONI, L. ; MENDONÇA, C. R.
sm1.diego@ifsc.usp.br

Chalcones are a molecular group with potential biological, pharmaceutical and optical applications. (1) These molecules are easy synthetized in laboratories, allowing molecular engineering in order to achieve the high nonlinearities desired for laser harmonic generation and optical limiters. In this work we studied the Hyper Rayleigh Scattering (HRS), a process related with the second order nonlinear property of four chalcones molecules with the same structural molecular framework, but with the substituent nitro (NO2) at distinct positions, as well as the unsaturation in the cyclohexene. The samples were dissolved in dimethyl sulfoxide (DMSO) and characterized. Linear absorption was determined using a UV-Vis spectrophotometer (Shimadzu UV-1800). HRS was performed using 100 ps pulses from a Nd:YAG laser at 1064 nm. The laser is focused at the sample and the scattered light at 532 nm is acquired by a photomultiplier. The results showed values for the HRS between 14.7 and 43.3 10-30 cm^5/esu for the first hyperpolarizability, showing that substituent and unsaturation position play a significant role on the charge distribution which directly impacts the nonlinearities. These results are interesting and can be used for molecular design strategies, indicating the best substituent position for increasing the nonlinearities, which is desirable for optical and photonics applications.

Referências:

1 LEMES, S. R. *et al.* Optical properties and antiangiogenic activity of a chalcone derivate. **Spectrochimica Acta Part A** : molecular and biomolecular spectroscopy, v. 204, p. 685-695, Nov. 2018. doi: 10.1016/j.saa.2018.06.099.

PG44

Low-cost biosensors based on screen-printed carbon electrodes modified with carbon black and polyelectrolytes films for detection of cancer biomarkers

IBÁNEZ-REDÍN, G. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; GONÇALVES, D.
gipi1908@gmail.com

Low-cost screen-printed carbon electrodes (SPCEs) modified with the cost-effective material, carbon black (CB), offer unparalleled insights into the development of user-friendly and inexpensive electrochemical devices to detect several analytes of environmental, pharmaceutical, and clinical interest.(1)However, despite these advantages, the capability of this platform of detecting clinical relevant biomarkers at point-of-care remains relatively unexplored. Here, we developed a low-cost electrochemical immunosensor for detecting pancreatic cancer antigen CA 19-9 using home-made SPCEs modified with composites based on CB and positively and negatively charged polyelectrolytes (i.e. polyethyleneimine (PEI) and polyacrylic acid (PAA)). Disposable devices were fabricated using poly(ethylene terephthalate) (PET) substrates and the working electrodes were modified with CB-polyelectrolyte films in layer-by-layer assembly. Stable flexible films were obtained with increased SPCEs surface area and enhanced device electrochemical response as verified using atomic force microscopy, cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy. The presence of carboxylic groups at the top layer (CB-PAA) enabled covalent immobilization of anti-CA19-9 antibodies without requiring additional surface functionalization. The concentration of CA19-9 was determined in a label-free protocol by monitoring the decrease in current intensity with the increment of antigen concentration in Fe(CN)63−/Fe(CN)64− by means of differential pulse voltammetry experiments. The resulting devices displayed a low-cost (< US$0.5), high selectivity, reproducibility (RSD= 3.24%) and low limit of detection of 0.02 U mL−1. Finally, the capability of the biosensor to detect CA 19-9 was evaluated in real samples from pancreatic cancer patients. The platform proposed here shows great promise for cancer biomarkers detection in clinical samples, since it is easily fabricated, disposable and relatively inexpensive.

Referências:

1 TROJANOWICZ, M.Impact of nanotechnology on design of advanced screen printed electrodes for different analytical applications. **Trends in Analytical Chemistry,** v.84,pte A,p. 22-47, 2016.

142

PG45

Análise da influência de elementos de transposição do clado CR1 na arquitetura do genoma do Schistossoma mansoni

CHEROBIN, E. ; DEMARCO, R.

eduardo.cherobin.martins@usp.br

Schistosoma mansoni é um platelminto parasitário, sendo um dos principais agentes etiológicos da esquistossomose em humanos. A esquistossomose constitui hoje um grave problema de saúde pública em vários países tropicais. A doença foi reportada em 78 países e pode ser considerada endêmica em 52 deles. Em 2012, pelo menos 249 milhões de pessoas estavam em regiões endêmicas, para as quais era recomendado o emprego de tratamento preventivo. Dezenas de retrotransposons já foram descritos no genoma do *S. mansoni* , sendo os transposons do tipo não-LTR os elementos móveis mais abundantes representando 15% do genoma. Elementos do tipo não-LTR no genoma do *S. mansoni* podem ser atribuídos aos clados CR1, R2 e RTE. Já foi previamente demonstrado que o parasito humano *Schistosoma mansoni* possui uma alta taxa transcricional de elementos de transposição e se observam expansões recentes no número destes elementos no genoma do parasito, destacando a importância destes elementos na estruturação recente deste genoma. (1) Portanto, um maior entendimento da distribuição de elementos transponíveis no genoma do *S. mansoni* permitirá obter maiores informações sobre o papel de elementos de transposição na evolução de genomas deste ramo evolutivo. Verificamos que todos os transposons do tipo não-LTR do clado CR1 possuem tendência significativamente maior do que a esperada ao acaso de se inserirem em regiões intergênicas e de forma colinear a genes que se encontram na vizinhança da inserção, sugerindo mecanismos de reconhecimento de genes. Tal tendência não é verificada em transposons do clado RTE, sugerindo que trata-se de característica relacionada especificamente a transposons do clado CR1. Além disso, três elementos pertencentes ao clado CR1 codificam para proteínas contendo um domínio PHD e apresentam uma tendência a se inserirem a pequena distância do sitio de inicio de transcrição do genoma, o que não é observado em transposons sem este domínio. Dados anteriores indicam que domínios PHD interagem com histonas com modificação H3K4me3 e que tais tipos de histona são frequentes em regiões de promoção de transcrição. Considerando estes dados sugerimos um mecanismo no qual a incorporação do domínio PHD em transposons do clado CR1 permitiu o direcionamento a esta região adjacente ao sítio de transcrição através da interação direta deste domínio com as histonas modificadas.

Referências:

1 VENANCIO, T. M. *et al.* Bursts of transposition from non-long terminal repeat retrotransposon families of the RTE clade in Schistosoma mansoni. **International Journal for Parasitology** , v. 40, n. 6, p. 743-749, May 2010.

PG46
Excitações magnéticas em magnetos frustrados inomogêneos

ALMEIDA, I. C. ; ANDRADE, E. C.
igor.almeida@ifsc.usp.br

Em sólidos reais, o fenômeno da desordem está sempre presente, surgindo por exemplo da falta ou excesso de átomos em sítios específicos do sólido. Estudamos nesse trabalho o efeito de desordem no modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ antiferromagnético na rede quadrada. Para tal, buscamos nessa primeira etapa encontrar o estado fundamental clássico numericamente utilizando-nos de métodos de minimização, como alinhamento com campo local e sua generalização, o método do gradiente. Com isso, primeiramente analisamos os casos homogêneos com $J_2 \leq 0.5J_1$ (ordem de Neel $[\pi, \pi]$) e $J_2 > 0.5J_1$ (ordem do tipo listras $[\pi, 0]$ ou $[0, \pi]$), inserindo posteriormente um termo biquadrático, levando em conta assim algumas correções quânticas ao modelo clássico. Feito isso, inserimos desordem no nosso problema, primeiramente fazendo $J_1^{ij} \rightarrow J\,(1 + \Delta)$ para apenas uma ligação (para $\Delta > 0$ e $\Delta < 0$). Depois disso, consideramos, também para apenas um dos sítios, $\overrightarrow{S}_{ij} = 0$, modelando assim uma vacância. Por fim, colocamos desordem em todas as ligações, fazendo $J_1^{ij} \rightarrow J\,(1 + \Delta_{ij})$ para cada ligação da rede. Tais cálculos foram efetuados objetivando encontrar a configuração clássica de menor energia para todos esses casos, de modo que estes possam ser utilizados como estados de referência para cálculos de onda de spin no espaço real (1), cálculos estes que serão feitos para melhor caracterizar o estado fundamental e o espectro de excitações de baixas energias deste modelo.

Referências:

1 ANDRADE, E. C.; VOJTA, M. Disorder, cluster spin glass, and hourglass spectra in striped magnetic insulators. **Physical Review Letters** , v. 109, n. 14, p. 147201-1-147201-5, Oct. 2012.

PG47

Label-free multispectral lifetime fluorescence to distinguish skin lesions

ROMANO, R. ; SALVIO, A. G. ; ROSA, R. ; JO, J. ; KURACHI, C.

renan.romano@gmail.com

Skin lesions are the most common human cancer diseases, usually, they are diagnosed by clinical visual inspection followed by biopsy and histological analysis. Early detection of these diseases is critical, depending on an accurate and trained dermatologist and can increase the survival rate. (1) Aiming for screening and early diagnosis of skin lesions, several techniques are presented, however, optical techniques are highlighted, since they present fast response through a noninvasive procedure. In this context, fluorescence steady-state and lifetime imaging show potential by being able to image metabolic changes using lesion endogenous contrast. (2-3) This study demonstrates an in vivo label-free multispectral fluorescence lifetime imaging system to distinguish pairs of clinically similar lesions. A pulsed Nd:YAG laser emitting at 355 nm is used to excite the endogenous fluorophores and three channels of acquisition bands are used to image the skin. This technique is able to generate multi-dimensional images of 140 x 140 pixels, where each pixel is a time vector of fluorescence decay of 451 temporal dimensions with steps of 0.4 nanoseconds. Data analysis comprises corrections to avoid artifacts, feature engineering, and classification for diagnosis. More than three hundred human lesions were analyzed by both linear classifiers and pixel-based neural networks. Preliminary results showed differences in the fluorescence lifetime engineered features between malignant and benign skin lesions, as well as the lesion and the healthy skin around. Obtained classifiers showed sensitivity and specificity of 75 % for melanoma lesions, which is the most aggressive skin cancer type. This study couples optical instrumentation with data science and pattern recognition. It is demonstrated as a potential tool to be applied as a screening technique in regions with a lack of well-trained dermatologists, being also suitable for telemedicine.

Referências:

1 MOGENSEN, M.; JEMEC, G. B. E. Diagnosis of nonmelanoma skin cancer/keratinocyte carcinoma: a review of diagnostic accuracy of nonmelanoma skin cancer diagnostic tests and technologies. **Dermatologic Surgery** , v. 33, n. 10, p. 1158-1174, 2007. 2 HEIKAL, A. A. Intracellular coenzymes as natural biomarkers for metabolic activities and mitochondrial anomalies. **Biomarkers in Medicine** , v. 4, n. 2, p. 241-263, 2010. 3 MARCU, L. Fluorescence lifetime techniques in medical applications. **Neurological surgery** , v. 40, n. 2, p. 304-331, 2012.

PG48

Investigação de relações entre estrutura e atividade de novas entidades químicas com propriedades antitumorais

SOUZA, M. S. ; FERREIRA, L. L. G. ; ANDRICOPULO, A. D.

matheus.souz9@gmail.com

Câncer é o nome dado a um grupo de doenças caracterizadas pelo crescimento desordenado de células anormais capazes de invadir inúmeros tecidos e órgãos. É considerada pela Organização Mundial da Saúde (OMS) a segunda principal causa de morte em todo o mundo, com quase 10 milhões de mortes, somente em 2018. Apesar de a quimioterapia contar com um importante arsenal de fármacos, os tratamentos estão associados à alta toxicidade, e muitos estão sujeitos à baixa eficácia e resistência.(1) Nesse contexto, o presente projeto de doutorado visa à identificação, caracterização e planejamento de novos ligantes bioativos com propriedades anticâncer. Séries de derivados heterocíclicos baseados na classe dos ciclopenta[b]indóis, das indolizinas e das oxadiazolas serão planejadas, sintetizadas e avaliadas quanto à sua atividade anticâncer in vitro e também em relação ao mecanismo de ação frente à proteína tubulina, um alvo molecular validado de grande interesse científico para o tratamento do câncer.(2) Os precursores sintéticos dessa série inédita de compostos bioativos foi descoberta em nosso grupo de pesquisa por meio da aplicação de estratégias de triagens bioquímicas que levaram a caracterização de novos moduladores da tubulina com pronunciada ação citotóxica e alta seletividade. Os compostos selecionados nessa nova etapa serão caracterizados quantitativamente quanto às suas propriedades de modulação da polimerização da tubulina e estabilização dos microtúbulos. Também será avaliada a citotoxicidade in vitro dos compostos por meio de ensaios de viabilidade e migração celular em linhagens tumorais, bem como a sua seletividade por meio de ensaios com fibroblastos humanos saudáveis. Estratégias em química medicinal, como a otimização múltipla de parâmetros, serão aplicadas no planejamento molecular dos novos compostos. Dessa forma, os compostos priorizados serão investigados por modelagem molecular em relação aos parâmetros farmacodinâmicos e farmacocinéticos fundamentais. Para esse trabalho, em consonância com os dados experimentais de potência, afinidade e seletividade, as análises de docagem molecular serão realizadas para caracterizar o modo de interação intermolecular dos compostos e para a geração de relações quantitativas entre a estrutura e atividade. Estudos de farmacocinética in silico e in vitro serão executados para avaliar propriedades como permeabilidade, metabolismo, e coeficiente de distribuição (eLogD). Estudos de citometria de fluxo serão conduzidos para a análise da progressão do ciclo celular dos compostos mais promissores. A integração desses métodos experimentais e computacionais avançados permitirá a descoberta de candidatos a novos agentes anticâncer, com perfis farmacodinâmico e farmacocinético otimizados.(3) O projeto de pesquisa compartilha os objetivos principais do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar), um dos CEPIDs da FAPESP (Processo 13/076003). O trabalho proposto será desenvolvido no Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC) do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, instituição sede do CIBFar/CEPID.

Referências:

1 FACINA, T. Estimativa 2014–incidência de câncer no Brasil. **Revista Brasileira de Cancerologia,** v. 60, n. 1, p. 63-64, 2014. 2 THU, K. L. *et al.* Targeting the cell cycle in breast cancer: towards the next phase. **Cell Cycle,** v. 17, n. 15, p. 1871-1885, 2018. 3 FERREIRA, L. G.; OLIVA, G.; ANDRICOPULO, A. D. From medicinal chemistry to hman health: current approaches to drug discovery

for cancer and neglected tropical diseases. **Anais da Academia Brasileira de Ciências,** v. 90, n. 1, p. 645-661, 2018.

147

PG49
Local oscillator module for MRI

BITTENCOURT, H. ; TANNÚS, A. ; VIDOTO, E. L. G.
heitor.bittencourt@usp.br

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 signal 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 reference signals have the same source. The output of a 10 MHz OCXO is differentiated to generate all the harmonics of 10 MHz up to 5 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. Both outputs are pure sine waves. To generate the FPGA clock, one output passes through a high speed clock driver to generate a differential clock signal. The other signal goes to a 1:16 power splitter to be distributed to all the spectrometer channels.

Referências:

1 WYATT, K. **Harmonic comb generators are useful tools.** 2015. Disponível em:https://interferencetechnology.com/harmonic-comb-generators-are-useful-tools/.Acesso em: 28.08.2017.

PG50
Perturbative QCD in hadronic tau decays and Renormalons

OLIANI, F. ; BOITO, D.
fabio.oliani@usp.br

Hadronic tau decays are one of the cleanest processes to study perturbative Quantum Chromodynamics (QCD). Combining the theoretical description of $\tau \to$ hadrons $+ \nu_\tau$ with the experimental data, it is possible to extract the strong coupling, α_s, with good precision. The perturbative contribution is obtained as a weighted integral on the complex contour of the perturbartive expansion of the Adler function in the chiral limit, which nowadays is exactly known up to α_s^4. To extract the coupling we need to choose the weight function so as to reduce non-perturbative contributions. The work of Ref.(1) has shown that some of the weight functions employed in the literature may have a bad perturbative behaviour, and are therefore not an ideal choice in precise α_s analyses. The main purpose of this work is to explain why some weight functions are better behaved than others in terms of the analytic structure of their Laplace-Borel transform, in particular,in terms of the singularities of the transform, known in this context as renormalons. We will investigate this problem in the large-β_0 limit of QCD, where the perturbative expansion is known to all orders. Next we will show that using a modified Borel-Laplace transform (2) we can simplify the analytic structure of renormalons in full QCD. Finally we will use a description of higher-orders perturbative coefficients that we developed recently using the method of Padé Approximants (3)to study in detail the perturbative behaviour of the weight functions QCD.

Referências:

1 BENEKE, M.;BOITO, D.; JAMIN, M. Perturbative expansion of tau hadronic spectral function moments and α_s extractions. **Journal High Energy Physics** , v.1301, p.125 2013 doi:10.1007/JHEP01(2013)125. 2 BROWN, L. S.;YAFFE, G.;ZAHAI, C. X. Large order perturbation theory for the electromagnetic current current correlation function. **Physical Review D** , v. 46,p.4712,1992. doi:10.1103/PhysRevD.46.4712. 3 BOITO, D.;MASJUAN, P.; OLIANI, F. Higher-order QCD corrections to hadronic decays from Padé approximants. **Journal High Energy Physics** , v. 1808, p.075,2018. doi:10.1007/JHEP08(2018)075.

149

PG51

Descoberta de derivados de marinoquinolina como inibidores de Plasmodium falciparum

SOUZA, G. E. ; AGUIAR, A. C. ; GUIDO, R.
guilherme.eduardo.souza@usp.br

A malária é uma doença infecciosa causada por protozoários do gênero *Plasmodium* spp. O surgimento de resistência aos tratamentos de primeira e segunda linha para a malária aguda não-complicada reforça a necessidade do desenvolvimento de novos candidatos a fármacos. Nesse contexto, a classe química das marinoquinolinas vem mostrando um promissor potencial antimalárico. O uso de uma abordagem integrada de avaliação de relações entra estrutura e atividade, atividade antiparasitária, e avaliação *in vivo* permitiu a identificação de um derivado marinoquinolínico como composto líder ((4-(7-methoxi-3H-pirrola[2,3-c]quinolin-4-il)-fenil)carbamato). (1) Dando continuidade ao processo de descoberta desta série química, quinze novos derivados foram planejados e sintetizados. A avaliação biológica reportada neste relatório revelou que substituintes heterocíclicos e volumosos na posição 4 do anel quinolínico são favoráveis para o aumento de potência e seletividade da série. Paralelamente, está sendo realizada a padronização de um ensaio para determinação da permeabilidade aparente em células Caco-2, o qual será utilizado para avaliação da permeabilidade *in vitro* das marinoquinolinas. As próximas etapas deste trabalho irão envolver o planejamento e a síntese de novos derivados marinoquinolínicos e sua avaliação biológica in vitro. Compostos mais potentes e seletivos terão sua permeabilidade in vitro avaliada, e os mais promissores serão selecionados para avaliação em modelos *ex vivo* e *in vivo* .

Referências:

1 AGUIAR, A. C. C. *et al*. Discovery of marinoquinolines as potent and fast-acting Plasmodium falciparum inhibitors with in vivo activity. **Journal of Medicinal Chemistry** , v. 61, n. 13, p. 5547-5568, 2018.

150

PG52

Seleção de bactérias isoladas de um reservatório brasileiro para a produção de biossurfactante

FERREIRA, J. F. ; BOSSOLAN, N. R. S.
jakeline.ferreira@usp.br

Biossurfactantes (BS) são compostos de origem microbiana que exibem propriedades surfactantes que podem distribuir-se em interfaces óleo/água/ar diminuindo as tensões superficiais e interfaciais. Na indústria petrolífera os BS têm várias aplicações, dentre as quais podem ser empregados em formulações de óleos lubrificantes; na biorremediação; na dispersão no derramamento de óleos; na remoção e mobilização de resíduos de óleo de estocagem e em processos de recuperação melhorada de petróleo (MEOR). (1) Nesse sentido, foi realizada a triagem de 14 linhagens bacterianas isoladas de óleo e rocha de um reservatório offshore localizado no sudeste do Brasil quanto à produção de BS. As linhagens foram cultivadas em meio líquido Luria-Bertani Broth (LB) por 7 dias consecutivos nas condições de cultivo originais de isolamento (37°C ou 55°C, ou 35 ou 70 g/L NaCl), com a realização de medidas de densidade óptica (DO) e da capacidade emulsionante de extratos livres de células (pelo índice de emulsificação E24). A linhagem com maior produção de biossurfactante (Ar35D5, pertencente ao gênero Bacillus) foi selecionada para continuar os ensaios testando-se diferentes condições de cultivo quanto à agitação, temperatura e salinidade. Para o ensaio estático ou em agitação (orbital a 150 rpm), o cultivo foi feito em meio LB na temperatura e salinidade de isolamento, 55°C e 35g/L, respectivamente por 6 dias consecutivos. No ensaio de temperatura foram testadas as temperaturas de 45, 55, 65 e 75°C e no ensaio de salinidade foram testadas a salinidade foram testadas as salinidades de 5, 22,5, 35 e 70g/L de NaCl. Ambos os ensaios foram cultivados por 7 dias e todos foram realizados em triplicata. Frascos controles foram incubados em iguais condições, sem o inóculo. Ainda com a linhagem Ar35D5 foi realizado um ensaio de emulsificação em diferentes substratos hidrofóbicos: querosene, tolueno, hexano, iso-octano, acetato de etila, n-butanol, clorofórmio, dicloroetano, diclometano, óleo mineral, lubrificante, óleo de canola, azeite de oliva, óleo de fritura e óleo de soja. Os resultados dos ensaios realizados mostraram que o crescimento e índice de emulsificação do biossurfactante foram melhores na condição estática (DO de 2,280 e E24 de 61,2%), na temperatura de 55°C (DO de 1,993 e E24 de 64,87% no tempo de 168h) e salinidade de 35g/L NaCl (DO de 2,250 e E24 de 67,8%, no tempo de 168h). O BS promoveu emulsificação em todos os substratos hidrofóbicos testados (com E24 no intervalo de 9,0 a 92,6%), sendo o maior E24 registrado para o óleo de oliva. Os resultados obtidos indicam que a linhagem Ar35D5 tem potencial para futuros testes em MEOR, devendo ainda ser avaliada quanto ao crescimento e produção de BS em diferentes fontes de carbono e nitrogênio.

Referências:

1 NITSCHKE, M.; PASTORE, G. M. Production and propertiers of a surfactant obtained from Bacillus subtilis grown on cassava wastewater. **Bioresource Technology** , v. 97, n. 2, p. 336-341, 2006.

151

PG53

Interaction mechanisms in chemotherapeutic drugs and cell membrane models associated with drug resistance

SANTOS, K. F. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.
kevin@ifsc.usp.br

The resistance developed by cancer cells to chemotherapeutic drugs is critical for the success of the treatment. The action of such drugs involves interactions with cell membranes which are protective physicochemical barriers that mediate the interaction between the cells and the external environment. Proteins in the cell membranes, e.g. cytochromes P450 and glutathione transferase, may inactivate or reduce the activity of the drugs, for example by restricting the bioavailability of the drugs in the plasma or target site. Cell membrane models are used to investigate the interaction between chemotherapeutic drugs and cell membranes. Langmuir monolayers are formed by amphiphilic molecules on the air-water interface, this system allows the control of a molecular arrangement, orientation, composition of surface and the properties of subphase. These features make Langmuir films a powerful model of the cell membrane. (1) In this Project, we shall employ Langmuir monolayers to mimic the membranes of healthy and cancer cells, in addition to the possible effects from the incorporation of cytochromes P450. In order to identify molecular-level mechanisms of drug resistance, the Langmuir monolayers will be studied with surface pressure isotherms, Brewster angle microscopy and polarization-modulated infrared reflection absorption spectroscopy (PM-IRRAS). It is hoped to identify drug resistance mechanisms, particularly those mediated by cytochromes P450, with the aim of finding ways to propose drugs that may improve cancer therapy.

Referências:

1 GLOMM, W. R. *et al.* Same system-different results: the importance of protein-introduction protocols in Langmuir-monolayer studies of lipid-protein interactions. **Analytical Chemistry** , v. 81, n. 8, p. 3042-3050, 2009.

152

PG54

Bioestimulação de sementes de soja com luz laser e biotable de comprimento de onda 660 nm

SARRETA, Y. ; CASTRO NETO, J. C.
yuri.oda@usp.br

Apesar dos grandes avanços na área de aplicações químicas voltadas para a agricultura, efeitos negativos do constante uso dessas tecnologias vêm sendo reportados. (1) Em contrapartida, métodos físicos como a irradiação de luz para a bioestimulação de sementes surgem como uma alternativa sustentável ao modelo de produção atual. Fitocromos são fotorreceptores que absorvem luz no comprimento de onda correspondente à cor vermelha (660 nm) quando em sua forma inativa, e interconvertem-se de maneira reversível para a forma ativa que absorve luz no comprimento de onda do infravermelho (730 nm). Dessa maneira, as plantas conseguem distinguir os diversos períodos do dia baseadas na intensidade e comprimento de onda da luz que recebem, direcionando seus processos biológicos de acordo com suas necessidades, como etapas de floração e germinação. (2) O presente projeto consiste no uso de um laser de diodo e do dispositivo iluminador Biotable, ambos de comprimento de onda 660 nm para a bioestimulação de sementes de soja. As sementes de soja foram submetidas à irradiação de luz vermelha e os parâmetros dose de luz, tempo de irradiação e potência luminosa dos equipamentos utilizados têm sido explorados ao longo do projeto. Dessa forma, características como a taxa de germinação das sementes, altura, peso das plantas, conteúdo de clorofila, entre outros, serão aferidos. A automatização da estufa construída para o projeto foi feita utilizando um Arduino Uno, responsável por coletar dados da temperatura e umidade da sala através do sensor DTH22, e permitir o monitoramento desses valores em um display azul LCD 16x2. A iluminação da bancada de cultivo foi feita com duas fileiras de três luminárias plafons de LEDs brancos (120 x 7,5 x 2,5 cm) controladas por timers com fotoperíodo (12h claro/12h escuro), fornecendo para as plantas um total de 15000 lux. O sistema de irrigação é composto por uma válvula solenóide (12 VDC) conectada à um módulo relé (1 canal - 5 VDC), responsáveis por permitir ou barrar a passagem de água para os aspersores em intervalos pré-definidos pelo código no Arduino. Como experimentos iniciais, foram realizados testes para analisar a porcentagem/velocidade de germinação das sementes controle (sem tratamento) e tratadas com luz vermelha. No primeiro experimento (in vitro), foram utilizadas três condições de tratamento com luz LED (0.5 h, 1.0 h e 1.5 h) e as sementes foram cultivadas em rolos de papel germitest em incubadora BOD, sendo avaliada a porcentagem de sementes germinadas. Nesse caso, o tratamento das sementes por 0.5 h apresentou a maior taxa de germinação de plântulas normais e menor taxa de plântulas anormais e sementes mortas. No segundo experimento (in vivo), as sementes tratadas por LED (0.5 h, 1.0 h e 1.5 h) e por laser de diodo (60 s, 120 s e 600 s) foram cultivadas em vasos contendo substrato na estufa construída e foi analisada a velocidade de germinação durante o período de 7 dias, à 25°C. Foram obtidas maiores velocidades de germinação para as sementes tratadas com luz LED (0.5 h) e laser (120 s).

Referências:

1 VASILEVSKI, G. Perspectives of the application of biophysical methods in sustainable agriculture." **Bulgarian Journal of Plant Physiology** , v. 29, n. 3/4, p. 179-186, 2003. 2 HERNANDEZ, A. C. *et al.* Laser in agriculture. **International Agrophysics** , v. 24, n. 4, p. 407-422, 2010.

PG55

Descoberta de candidatos antivirais baseados na estrutura da enzima NS5 RNA polimerase RNA-dependente do vírus da febre amarela

OLIVEIRA, V. G. F. ; NOSKE, G. D. ; GODOY, A. S. ; OLIVA, G.

victor.gawriljuk.oliveira@usp.br

Durante os últimos anos o Brasil voltou a apresentar surtos de febre amarela em regiões próximas aos grandes centros urbanos, o que deixou mais de duas mil mortes e milhões em risco de contrair a infecção viral. Uma campanha em massa foi realizada a fim de vacinar a população e evitar a propagação do vírus para a região urbana. (1) A falta de um tratamento para a febre amarela é um grande problema de saúde pública, uma vez que quando as pessoas infectadas atingem os níveis mais severos da doença, os índices de mortalidade podem atingir 50%. (2) O vírus da febre amarela é um membro da família *Flaviviridae* , com genoma constituído por uma única fita positiva de RNA que codifica por três proteínas estruturais e outras sete não estruturais. A proteína não-estrutural NS5 do vírus da febre amarela contém dois domínios que desempenham funções centrais para a replicação do RNA viral na célula infectada: um domínio tipo RNA polimerase RNA-dependente (RpRd) e um domínio metiltransferase. O bloqueio específico de qualquer uma destas funções é letal para a replicação viral, tornando essa proteína um alvo promissor para a procura de novos fármacos. (3) Neste projeto é proposto a elucidação estrutural do domínio RpRd da NS5 de febre amarela, seguida da procura por ligantes para essa enzima utilizando a estratégia de planejamento baseado na estrutura do receptor. A fim de obter cristais para difração em raio-x o domínio RdRp da NS5 de febre amarela foi expresso heterologamente em *S. cerevisiae* utilizando o vetor de expressão pBEVY-GU e purificada por cromatografia de afinidade por níquel seguida de cromatografia de exclusão molecular. Os ensaios de cristalização foram realizados utilizando kits de matriz esparsa ou com condições específicas utilizando o método de *hanging drop* ou *sitting drop* . Até o momento foi possível obter cristais da proteína em duas condições diferentes, sendo necessário reproduzi-los novamente para futura otimização. Além disso, a coleta dos dados de difração por raio-x dos cristais será realizada para verificar a sua qualidade e se possível, resolver a estrutura.

Referências:

1 POSSAS, C. *et al*. Yellow fever outbreak in Brazil: the puzzle of rapid viral spread and challenges for immunization. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz** . doi: 10.1590/0074-02760180278. *In press* . 2 DOUAM, F.; PLOSS, A. Yellow fever virus: knowledge gaps impeding the fight against an old foe. **Trends in Microbiology** , v. 26, n. 11, p. 913-928, Nov. 2018. 3 SAMPATH, A.; PADMANABHAN, R. Molecular targets for flavivirus drug discovery. **Antiviral Research** , v. 81, n. 1, p. 6-15, Jan. 2009.

PG56

Characterization of atmospheric gases nonlinear refractive index and energetic deep UV generation in hollow core fiber

SOUZA, T. G. B. ; MISOGUTI, L.

tiago.gualberto.souza@usp.br

Propagation of ultrashort laser pulses in gaseous media demands a precise knowledge of nonlinear (NL) effects and how their dependence on pulse characteristics. However, due to their low density, gases NL effects are relative weak if compared with solids (four orders of magnitude), and complex experimental setup must be employed to evaluate nonlinearities on them. The knowledge of NL effects on gaseous media is fundamental to several applications, such as: high harmonic generation, attosecond physics, filamentation, white light generation, terahertz production, compression of ultrashort pulses, LiDAR, among others.Very recently, our group have developed a new experimental setup to characterize gases NL refractive index (n_2) in simplified manner(1), when compared with the other methods (self-phase modulation (SPM), Kerr effect, four-wave mixing (FWM)). Ours experimental setup employed up to hundreds μJ, tunable temporal pulse width (60 fs to 3 ps), at 800 nm in order to measure NL elliptical rotation (NER) effect in gaseous media confined on hollow core fiber (HCF). The use of an extended interaction length, provided by the HCF propagation, was necessary to overcome the gaseous weak NL effects. On this way, we were able to evaluate n_2, and its dependency with the excitation pulse width (τ_p), for principal atmospheric constituting gases (He, Ar, N_2 and O_2). The sample n_2 fast (pure electronic, fs-scale) and slow (molecular orientation, ps-scale) contributions and their intermediate values were fully characterized varying τ_p from 60 fs to 3 ps. In addition, we have proposed an empirical model that allow one to obtain the gaseous n_2 for any pulse width constrained within the electronic and molecular contribution range.(2)Once the gaseous sample have been characterized, we employed the knowledge of the rare gases n_2 to better tailor the conditions to produce a wavelength tunable ultra-short and energetic source of deep ultraviolet (DUV) via soliton dispersive wave emission (DWE) in HCF.(3) That source is mainly desired for materials spectroscopy, opening a way for a new range of investigation. Consequently, we produced a soliton DWE propagating 1 mJ, sub-10 fs pulse in the IR (800 nm) through a 2 m long and flexible HCF filled with noble gases. Then, we were able to generate an energetic (tens of muJ), tunable (150 – 350 nm), and ultra-short (tens of fs) DUV beam through DWE.

Referências:

1 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. 2 DE SOUZA, T. G. B. *et al.* Measurement of nonlinear refractive index of air, oxygen, and nitrogen in capillary by changing the temporal width of short laser pulses. **Journal Optical Society of America B**, v.34, n.10,p. 2233-2237,2017. 3 TRAVERS, J. C. *et al.* High-energy pulse self-compression and ultraviolet generation through soliton dynamics in hollow capillary fibres. **Nature Photonics**, 2019.doi.org/10.1038/s41566-019-0416-4.

PG57

Marcação com laser femtosegundo em superfícies metálicas: criação de estruturas nanométricas em prata pura

MATTOS, V. S. ; PAOLILLO, F. R. ; CAVALLINI, D. ; YASUOKA, F. M. M. ; GUIMARÃES, F. E. G. ; SILVA, M. A. P. ; CASTRO NETO, J. C.

vicente.mattos@usp.br

Metais preciosos possuem alta ductilidade, maleabilidade e condutibilidade e são importantes para microfabricação e desenvolvimento de sistemas com plasmons pois possuem condutibilidade elétrica e térmica altas, sendo a prata o metal com o maior destas propriedades, além de vantagens em comparação a outros metais para o uso em plasmônica, uma vez que mantém plasmons de superfície de alta intensidade na faixa de comprimento de onda de 300 a 1200 nm. (1) A preparação da superfície exige cuidados importantes de limpeza e polimento, uma vez que alguns materiais podem ser inseridos dentro do metal, devido à sua baixa dureza. Modificações em superfícies metálicas com uso de laser altera a superfície em diferentes formas, tanto para a formação de nanopartículas, micro e nanofabricação para microeletrônica ou criação de padrões na superfície irradiada. A irradiação por laser femtosegundo se mostra como uma ótima ferramenta para a a criação de modificações na estrutura, principalmente devido à superação do limite da difração na definição de estruturas com tamanho menor que o comprimento de onda de incidência. (2) O objetivo do trabalho foi a criação de nanoestruturas em prata pura utilizando laser femtosegundo pulsado. Para tanto, foi utilizado um laser Libra femtosegundo de 450 mW, 1 KHz de frequência e comprimento de onda de 850 nm da Coherent para a marcação de placas de prata pura polidas, embutidas em baquelite para maior precisão do polimento. Os parâmetros de marcação variados foram a distância da amostra ao foco do laser, velocidade de varredura, distância entre linhas consecutivas de marcação, e a quantidade de varreduras. Foram obtidos diferentes perfis de nanoestruturas. Com parâmetros de menor intensidade (maior distância ao foco do laser, maior velocidade de varredura e distância entre linhas para apenas uma varredura) foram gerados padrões regulares com periodicidade de 450-600 nm, quando analisado por microscopia eletrônica de varredura (MEV) e microscopia de força atômica (AFM), estruturas estas que apresentaram o fenômeno de iridescência quando observadas sob iluminação por luz branca. Por outro lado, com uso da combinação de parâmetros onde mais energia era transmitido ao material, com a amostra sobre o foco do laser, menor velocidade de marcação e distância entre linhas consecutivas, foram obtidas estruturas caóticas, formadas com aglomerados de nanoestruturas esféricas por toda a região marcada. Na análise por MEV, estas esferas apresentaram tamanhos variando de 10 a 500 nm, se arranjando em diferentes perfis sobre a estrutura, além de a composição como um todo apresentar elevação acima da superfície polida de cerca de 0,53 mm.

Referências:

1 RYCENGA, M. *et al.* Controlling the synthesis and assembly of silver nanostructures for plasmonic applications. **Chemical Reviews** , v. 111, n. 6, p. 3669-3712, 2011. 2 KULADEEP, R.; JYOTHI, L.; RAO, D. N. Femtosecond laser micro/nano machining on metallic and semiconductor materials. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON NANOMATERIALS: APPLICATIONS AND PROPERTIES, 4., 2014, Alushta. **Proceedings[...]** Lviv: Sumy State University, 2014. v. 3, n. 1, p. 01PCSI08.

PG58
Cargas Aceleradas e Princípio de Equivalência

WESTIN, R. ; VANZELLA, D.
raian.westin@usp.br

Segundo o Princípio de Equivalência de Einstein, não deve ser possível que um observador consiga diferenciar, por experimentos locais, se está parado em um campo gravitacional estático ou sujeito a uma aceleração própria constante.(1) Já pela teoria clássica de electromagnetismo (Equações de Maxwell), sabemos que cargas elétricas sujeitas a acelerações devem irradiar.(2) No entanto,é consenso que uma carga elétrica parada num campo gravitacional não irradia, puramente por argumentos de conservação de energia. Como conciliar esses fatos com o Princípio de Equivalência?O foco deste projeto de mestrado é revisitar o problema da radiação de uma carga uniformemente acelerada, tanto do ponto de vista de um referencial inercial, quanto do ponto de vista co-acelerado com a carga, e analisar os resultados à luz do Princípio de Equivalência. Para isso, obtém-se a expressão do campo eletromagnético, em ambos os referenciais, para determinar a existência ou não de radiação em cada um deles.Além disso, faz-se necessário analisar a dependência dos resultados com as condições iniciais do campo, uma questão essencial para obtermos respostas físicas a partir da idealização de uma carga uniformemente acelerada desde sempre encarada como situação limite de uma carga inicialmente inercial que começou a acelerar arbitrariamente no passado. Sutilezas que aparecem na situação idealizada – como resultados conflitantes a respeito da existência ou não de radiação mesmo do ponto de vista inercial exigem que uma situação mais realista seja analisada.

Referências:

1 MISNER, C. W. *et al.* **Gravitation** . New York: W, H. Freeman, 2017. 2 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to electrodynamics.** 3rd. ed. New York: Prentice-Hall, 1999.

157

PG59
Dipolar Bose-Einstein condensates in bubble traps

DINIZ, P. ; HENN, E. ; AMANCIO, E. ; LIMA, A.
pedro.diniz@usp.br

The study of Bose-Einstein condensates basically happens inside conservative traps. An important feature of these systems is that the trap strongly determines the properties of the cloud of atoms, therefore the investigation of the Bose-Einstein condensates in diverse geometries of trapped atoms is a very rich and interesting area of research. A possible geometry is the "bubble"(1), which corresponds to a trap that confines the atoms in a spherical surface. Recently, this geometry has been observed and studied in the spacial station. The reason why these experiments must take place in space is because the influence of gravity makes it impracticable to produce a bubble shaped condensate. In addition to the geometrical aspect there is also the possibility of making Bose-Einstein condensates from atoms with high magnetic dipole moment. This is interesting because the dipole-dipole interaction is anisotropic and long ranged, in contrast with the usual mean field interaction that appears in the Gross-Pitaewiski equation which is isotropic and short ranged. Consequently, BECs made of dipolar atoms present different and more complex behavior when compared with those that have pure contact interaction. Our work consists in a theoretical investigation of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap with all the dipoles alligned in one spacial direction. We were able to obtain the density distribution and energy of the ground state for many different values of the relevant parameters as well as the frequencies of collective modes of vibration of the condensate. The strategy used to obtain the ground state was to calculate the total energy of the system and minimize it. In order to calculate the energy we first needed to make some assumptions about the wave function. For the radial behavior a gaussian dependence was chosen so the atoms would always be confined in a very thin spherical shell with fixed radius and thickness. Having the radial dependence fixed we left the angular distribution completely arbitrary expressing it as a spherical harmonics expansion, and with this ansatz the total energy was calculated. The final expression for the energy ended up being a polynomial of the angular expansion coefficients, so we proceeded with the minimization proccess using those as the variational parameters. This procedure was repeated for many different dipolar interaction "strengths". Our results showed that as the dipolar interaction increases the atoms tend to concentrate around the equator of the bubble with vanishing density at the poles. Having the ground state at hand we were then able to calculate the frequencies of some collective modes of excitation. The method we used to obtain these frequecies is called "sume rule approach", wich is very convenient since the only thing we need in order to apply it is the ground state. We obtained the dependence of the monopole, dipole and two quadrupole excitations upon the dipolar interaction and observed that the dipole excitation presents interesting features.

Referências:

1 SUN, K. Static and dynamic properties of shell-shaped condensates. **Physical Review A** , v. 98, n. 1, p. 013609-1-013609-24, July 2018.

158

PG60

Influência das características de conectividade na execução distribuída de tarefas em redes complexas

PASTORE, A. M.
alexandre.pastore@usp.br

Diversos sistemas são compostos por elementos que interagem entre si ao desempenhar as suas funções, o que torna sua representação como redes complexas apropriadas. (1) Iremos estudar a influência de características topológicas da rede de interconexão entre os agentes na eficiência da execução da rede de interconexão entre os agentes na eficiência da execução distribuída de tarefas. Mais explicitamente, serão consideradas características dos nós (grau médio, heterogeneidade da distribuição de graus e correlações entre graus de nós conectados entre si) e de localidade das ligações (presença de conjuntos de três nós conectados entre si, localidade das ligações quando os nós estão distribuídos em um espaço geométrico de dimensionalidade finita e formação de comunidades de nós altamente conectados entre si mas com poucas conexões com os restantes). As tarefas serão consideradas homogêneas em suas características (ou tarefas idênticas ou com diferenças aleatórias sorteadas de distribuições sem cauda longa) e similarmente geradas por qualquer agente. Com isso pretendemos adquirir informações sobre que tipo de características topológicas uma rede deve possuir para que ela seja adequada à execução distribuída de tarefas, isto pode ser importante na situação em que uma rede em que se pretende usar para execução de tarefas e por uma análise puramente topológica prever se seu desempenho será apropriado ou não, pode se usar quando se tem um conjunto de agentes a serem interligados para execução de tarefas, tem-se indicações sobre que tipo de topologia deve ser gerada para uma boa eficiência, além da situação em que uma certa rede está sendo usada para execução de tarefas, pode-se propor alterações que levem a um incremento em sua eficiência.

Referências:

1 COSTA, L. F. *et al*. Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks: a survey of apllications. **Advances in Physics** , v. 60, n. 3, p. 329-412, 2011.

159

PG61
Estudos estruturais e funcionais em xilose isomerase

BRIGANTI, L. ; POLIKARPOV, I.
lorenzo_briganti@outlook.com

Nos últimos anos, uma crescente preocupação com a disponibilidade de recursos utilizados como matéria-prima na indústria fez com que a chamada Química Verde se desenvolvesse de maneira contundente. O foco dessa nova área se estende desde a área ambiental até a nanotecnologia. (1) Na vanguarda da Química Verde podemos destacar a produção de biocombustíveis. Uma das estratégias propostas seria a produção de biocombustível à partir de material lignocelulósico, ou seja, produzido à partir de resíduos agrícolas, como bagaço e palha vegetal. No bagaço, por exemplo, cerca de 28% da sua constituição é hemicelulose (2), cujo composto majoritário é a xilose. 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) (3), presente em diversos organismos. O objetivo do presente estudo foi identificar e caracterizar XIs de relevante interesse industrial, ou seja, de pH e temperatura ótimos com valores semelhantes ao encontrado no processo produtivo industrial. Além disso, uma XI foi caracterizada bioquimicamente e estruturalmente, além de ser submetida a ensaios de fermentação.

Referências:

1 SHELDON, R. A.; ARENDS, I. W. C. E.; HANEFELD, U. **Green chemistry and catalysis** . Weinheim: Wiley-VCH, 2007. 433 p. 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, p. 54-1-54-18, 2011. doi: 10.1186/1754-6834-4-54. 3 ASBÓTH, B.; NÁRAY-SZABÓ, G. Mechanism of action of D-xylose isomerase. **Current Protein and Peptide Science** , v. 1, n. 3, p. 237-254, 2000.

160

PG62

Transport phenomena of a single molecule through a nanopore

ZAGO, L. A. ; GUIMARAES, F. E. G.

leandro.zago@usp.br

With advances in nanotechnology techniques, the necessary refinement has been achieved so that new devices emerge and allow the observation of phenomena involving a single molecule. In this way, the polymethyl methacrylate polymer (PMMA) will be used as the material (1) for the production of thin films (in the order of 100nm) by spin-casting technique, and nanometrc pores will be produced in a controlled manner, (FIB) which consists of accelerating heavy ions to the energies of a few tens of KeV and focusing them on a target. It will also be used an electrolytic cell, where measurements of transport phenomena (2) will be made, such as the diffusion of a single protein through the membrane, where characteristics such as diffusion velocity, length of the molecule and its conformation will be observed, using the flow variation of current as the molecule travels through the nanopore. For an in-depth study the problem will be modeled computationally, in this way we can observe theoretical results and confront them with those obtained experimentally, as well as having the freedom to vary aspects of the system as pore shape and morphological properties of study molecules. These new devices capable of observing the transitions of the isolated molecules (3) through the nanopore will be functionalized, so that a current-rectifying response can be obtained through asymmetric pores using the deposition of surface charges, aiming at the creation of ultra-sensitive sensing devices for certain proteins for the detection of diseases in the early stages quickly and inexpensively.

Referências:

1 MOAZED, B; HASHEMI, M; ACHENBACH, S. Novel PMMA polymer-based nanopores capable of detection and discrimination between structurally different biomolecules. **IEE Sensors Journal** , v. 14, n. 9, p. 3292-3309, 2014. 2 PLETT, T. S. *et al*. Solid-state ionic diodes demonstrated in conical nanopores. **Journal of Physical Chemistry C** , v. 121, n. 11, p. 6170-6176, 2017. 3 TAN, S. *et al*. Detection of a single enzyme molecule based on a solid-state nanopore sensor. **Nanotechnology** , v. 27, n. 5, p. 155502-1-155502-11, 2016.

161

PG63

Uma análise crítica do suposto pioneirismo galileano da matematização da natureza

FERREIRA, C. ; CELESTINO, C.
ciro.ferreira@usp.br

A Revolução Científica dos séculos XVI e XVII é costumeiramente considerada como o evento fundador da ciência moderna, que teria se originado a partir de um rompimento com a cosmovisão aristotélica. No caso da física uma das questões que contrastariam o pensamento antigo com aquele que teria surgido durante a revolução seria a aplicação da matemática à natureza. O primeiro se limitaria a uma descrição qualitativa dos fenômenos, enquanto o segundo usaria leis quantitativas e estruturas matemáticas. Entretanto, o papel que diferentes historiadores atribuem à matematização no estabelecimento da ciência moderna varia. Por exemplo, Dijksterhuis (1892-1965) entendia a incorporação da matemática como o elemento central da emergência da ciência, pois essa oferecia a ciência uma linguagem precisa que permitiria a checagem de suas afirmações com o mundo empírico e uma melhor descrição deste. Em contraste, Koyré (1892-1964) via a matematização como aspecto subsidiário da ciência moderna, afirmando que esta se distinguia da filosofia antiga ao postular um universo infinito, contrário ao cosmos finito e ordenado aristotélico. Além disso, para Koyré a matemática não era apenas uma linguagem descritiva, como no caso de Dijksterhuis, mas sim reveladora da essência da natureza(1).Uma semelhança que muitas abordagens historiográficas possuem é a menção de Galileu Galilei (1564 - 1642) como personagem de destaque nesse processo, as vezes adquirindo status de pioneirismo. Nosso objetivo é problematizar este status e a suposta descontinuidade entre filosofia antiga e ciência moderna imposta pelo pensamento galileano, e mostrar que a veracidade destas afirmações é submetida a perspectiva historiográfica adotada.Visando estipular a posição adequada de Galileu nesta questão iremos ressaltar as contribuições de seus predecessores, tanto em relação a matematização de fenômenos específicos quanto a desenvolvimentos filosóficos da relação entre matemática e natureza. Analisaremos também quais empecilhos à matematização permaneceram mesmo após a obra de Galileu.Mencionamos então, brevemente, exemplos de cada um desses fatores. Quanto à matematização de fenômenos, cito os estudos de balística de Niccòlo Fontana Tartaglia (1500-1557), que utilizava objetos geométricos para modelar a forma da trajetória de um projétil.(2) Quanto aos desenvolvimentos filosóficos podemos citar a própria filosofia aristotélica, que não era completamente intransigente ao uso da matemática nos estudos da natureza como se crê frequentemente. Isso é atestado pela existência da disciplina *matemáticas mistas* no corpo de conhecimentos aristotélicos, espécie de subdisciplina matemática que incluía dados empíricos em suas premissas. Entretanto as premissas empíricas e matemáticas deveriam estar sujeitas a uma determinada hierarquia.(2) Por último mencionamos uma resistência à obras exageradamente matemáticas que ocorreu após a publicação dos *Princípios matemáticos* de Newton, dizendo que tal linguagem restringiria demasiadamente o número de pesquisadores capazes de estudar esse assunto, dada a baixa familiaridade dos autores da época com uma matemática tão rebuscada; além de outras críticas de caráter epistêmico e ontológico.(3)Em posse destas considerações, e levando em conta uma pluralidade de perspectivas historiográficas, discutiremos em que medida a afirmação de que "Galileu foi o primeiro a matematizar a natureza" é verídica, ou em que medida é apenas um exagero grosseiro.

Referências:

1 COHEN, H. F. **The scientific revolution** : a historiographical inquiry. Chicago: The University of

Chicago Press, 1994. 2 CPECCHI, D. **The Path to Post-Galilean epistemology** : reinterpreting the birth of Modern Science. New York: Springer,2018. v. 34. 3 GINGRAS, Y. What did mathematics do to physics? **History of Science** , v.39, n. 4,p.383-416, 2001.

163

PG64

Using moleculary dynamics to study Langmuir monolayers mimicking pulmonary surfactant

ZAPATA, J. C. B. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.
juan.burbano@ifsc.usp.br

Pulmonary surfactant can be modeled as a phospholipid Langmuir monolayer at the air/water interface.(1) This interaction was studied here using molecular dynamics (MD) simulation, which is a classical computational approach to study systems made of a large number of molecules. This technique is based on the solution of Newton's equations for all the molecules in the system to predict some of the physical properties. We used the software GROMACS with the Martini force [U+FB01]eld, based on a four-to-one mapping (2-3) (four heavy atoms are represented by a single interaction center), with 64-128 lipid molecules plus water using two lipid compositions, namely dipalmitoyl phosphatidyl choline (DPPC) and DPPC mixed with palmitoyl oleoyl phosphatidyl choline (POPC), to mimic the properties of lung surfactant. The results show that the differences in lipid composition affect the surface pressure of the monolayer.

Referências:

1 DOYLE, R. *et al*. Molecular dynamics simulations of lung surfactant lipid monolayers. **Biophysical Chemistry** ,v.138, n.3, p.67-77,2008. 2 MARRINK, S. J. *et al*.The MARTINI force field: Coarse grained model for biomolecular simulations. **Journal of Physical Chemisty B** , v.111, n.27,p.7812-7824,2007. 3 NIELSEN, S. O. *et al*. Molecular dynamics investigations of lipid Langmuir monolayers using a Coarse-Grain model. **Journal of Physical Chemistry B** , v.107, n.50,p.13911-13917,2003.

164

PG65

Desacoplamento dinâmico contínuo generalizado: implementação

NAPOLITANO, R. J. ; HILARIO, A.
adonai.silva@usp.br

Os computadores quânticos são um artifício de enorme interesse para a comunidade científica, alguns algorítimos computacionais importantes não podem ser implementados de maneira eficiente nem com uso dos computadores clássicos mais avançados que temos hoje. Além de apresentarem poder computacional muito superior ao que temos acesso atualmente os computadores quânticos prometem revolucionar diversas áreas como a economia, criptografia e muitas outras. A principal diferença entre um computador quântico e um clássico é a forma como a informação é recebida e transmitida. Em um computador clássico a informação é processada através de *bits* , que assumem valor 0 ou 1, o análogo em um computador quântico são os *qubits* , que podem assumir qualquer combinação de dois estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ e colapsar para um deles quando a informação do *output* é obtida. Para evitar que a informação colapse antes que a medida final seja feita é necessário proteger os *qubits* de ruídos externos e um dos métodos usados para tal feito é o chamado desacoplamento dinâmico contínuo (1-2), que consiste em aplicar campos externos de forma a desacoplar a hamiltoniana que descreve a evolução temporal dos *qubits* da que descreve o ambiente externo, fazendo com que a hamiltoniana que descreve a interação "sistema $+$ ambiente externo"se anule em média temporal. O objetivo deste trabalho é estudar uma possível extensão e aplicações deste método para *qudits* , isto é, a unidade básica de informação que pode ser combinação não de apenas dois mas de d estados: $|0\rangle$, $|1\rangle$, $\cdots$ $|d-1\rangle$. A motivação é o fato de que computadores cuja unidade básica de processamento de informação são *qudits* poderiam apresentar maior poder computacional para quanto maior fosse d. Nos primeiros meses da vigência deste projeto foi estudado como aplicar o método de desacoplamento dinâmico contínuo generalizado (GDCC) para três estados hiperfinos do estado fundamental do átomo de ^{87}Rb, que formariam um *qutrit* (*qudit* de dimensão três). Foi visto que é possível, em teoria, desacoplar o *qutrit* de ruídos externos usando um conjunto de nove lasers com três tipos de polarização diferentes e frequências de Rabi dependentes do tempo. Futuramente pretendemos executar simulações para testar a eficiência do método GDCC para este caso e, eventualmente, tentar implementar de forma prática em parceria com outros grupos de pesquisa, assim como estudar outras possíveis aplicações teóricas e práticas para o método.

Referências:

1 FANCHINI, F. F.; HORNOS, J. E. M.; NAPOLITANO, R. D. Continuously decoupling single-qubit operations from a perturbing thermal bath of scalar bosons. **Physical Review A** , v. 75, n. 2, p. 022329-1-022329-4, Feb. 2007. 2 FANCHINI, F. F.; NAPOLITANO, R. D. J. Continuous dynamical protection of two-qubit entanglement from uncorrelated dephasing, bit flipping, and dissipation. **Physical Review A** , v. 76, n. 6, 062306-1-062306-4, Dec. 2007.

165

PG66

Antifungal activity of a biosurfactant produced by a thermohalophilic bacillus strain

ARGENTIN, M. N. ; BOSSOLAN, N. R. S.

marcela.argentin@usp.br

Biosurfactants (BS) are amphiphilic microbial secondary metabolites capable of reducing the surface and interfacial tensions and form stable emulsions, characteristics that make them highly applicable in different industrial sectors.(1) Some biosurfactants produced by *Bacillus* strains have shown antifungal activity, especially lipopeptides belonging to iturin, fengycin and surfactin families.(2)The goal of this work was to characterize the BS produced by a thermohalophilic *Bacillus alveayuensis* (strain Ar70C7-2) isolated from a Brazilian offshore reservoir rock sample, determining its chemical structure, and its antifungal activity. The BS produced by *B. alveayuensis* belongs to the class of lipopeptides, with the probable presence of surfactin, fengycin and iturin, which led us to perform a preliminary screening to evaluate its antifungal activity. The biosurfactant was produced in Mineral Medium (70 g/L of NaCl) with glycerol, and NH4NO3 as carbon and nitrogen sources, at 55 ºC. Crude BS obtained by acid precipitation (0.27 g/L yield) was extracted with chloroform followed by semi-purification on a silica gel 60 column. Antifungal activity was determined by the agar-well diffusion method (3) against eleven different phytopathogenic fungal strains using BS semi-purified. Fungal mycelium and spore suspensions were cultured on Potato-Dextrose-Agar (PDA) at 28 ºC for 15 days, with and without rifampicin (this antibiotic was used to avoid bacterial contamination). Mycelia growth was considerably reduced in eight fungal strains in comparation with the control plates. Complete inhibition of hyphal growth was observed in cultures of *Ceratocystis paradoxa* , *Phytophthora sojae* and *Lasidiplodia euphorbicola* . In the cultures with spore solution, we observed inhibition zones after 5 days of incubation for *Moniliophthora perniciosa* , *Sclerotinia sclerotiorum* , *Ceratocystis paradoxa* and *Rhizopus microsporus* . There was no difference between growth patterns under curture media with and without rifampicin addition. Further studies comprising antibacterial and antitumor activity assays are the next steps of this work.

Referências:

1 MUKHERJEE, A. K.; DAS, K. Microbial surfactants and their potential applications: an overview. *In:* SEN, R. **Biosurfactants** . New York: Springer,2010. v. 672, p. 54-64.(Series advances in experimental medicine and biology) 2 INÈS, M.; DHOUHA, G. Lipopeptide surfactants: Production, recovery and pore forming capacity. **Peptides** , v. 71, p. 100–112, 2015.doi:10.1016/peptides2015. 3 AMBRICO, A.; TRUPO, M. Efficacy of cell free supernatant from Bacillus subtilis ET-1, an Iturin A producer strain, on biocontrol of green and gray mold. **Postharvest Biology and Technology** , v. 134, p. 5–10, 2017.

166

PG67

Theranostic nanomaterials coated with cell membrane for nanomedicine applications

LINS, P. M. P. ; CANCINO-BERNARDI, J. ; ZUCOLOTTO, V.

ppincela@gmail.com

Plasmonic nanoparticles are promising materials for biomedical applications, especially in photothermia. Gold nanorods (NRs) are excellent materials for such applications because of their anisotropy, stability and tunable optical properties. (1) However, the passive targeting of NRs is insufficient for therapeutical use. Among the tools used to overcome this challenge, the coating of nanoparticles with endogenous materials has been considered by its low cost and biocompatibility. It is known that the presence of tetraspanin CD47 increases the circulation time, avoiding phagocytosis. (2) Additionally, the exosomes contains tetraspanins that promotes their use in cellular communication at long distances. (3) The goal of this project is to create a theranostic system that uses gold nanorods coated with extracellular vesicles (EVs) and cell membranes from RAW264.7 cells. TEM analysis revealed that the extracted extracellular vesicles presented a diameter of 30 nm and the membranes exhibited larger structures of 200 nm in diameter. Potential zeta values of the EVs was -18 mV and of the membrane was -27 mV. Results from functionalization showed that negatively charged nanorods possess a higher capability to embrace the cell membrane. (2)

Referências:

1 DICKERSON, E. B. *et al*. Gold nanorod assisted near-infrared plasmonic photothermal therapy (PPTT) of squamous cell carcinoma in mice. **Cancer Letters** , v. 269, n. 1, p. 57-66, 2008. 2 LUK, B. T. *et al*. Interfacial interactions between natural RBC membranes and synthetic polymeric nanoparticles. **Nanoscale** , v. 6, n. 5, p. 2730-2737, Mar. 2014. 3 ARMSTRONG, J. P. K.; HOLME, M. N.; STEVENS, M. M. Re-engineering extracellular vesicles as smart nanoscale therapeutics. **ACS Nano** , v. 11, n. 1, p. 69-83, 2017.

167

PG68

Study of interaction between calibrated sea water, oil and carbonatic rocks by nonlinear vibrational spectroscopy

PALMA, N. B. ; MIRANDA, P. B.
nicolau.filho@usp.br

Nowadays there are many industries exploring the Brazilian "pre-salt" oil reservoirs to supply the future energy needs. However, both the oil and rock compositions are very different for these reservoirs and thereby new studies are needed to enhance the extraction with several strategies, including the low salinity water injection (LSWI). There is a large body of recent research in the literature about oil recovery by low salinity water injection spanning approximately the last 18 years.(1)Several coreflood experiments have shown that LSWI may, but not always, increase oil recovery compared with conventional seawater-flood. Here we propose a novel study with sum-frequency generation vibrational spectroscopy (SFG) to investigate the oil-water-rock interactions at the molecular level, aiming at the understanding of the role of water salinity on the rock wettability by water against oil, which could lead to improvement in the oil recovery. SFG spectroscopy is a nonlinear optical technique that can provide important information about the chemical nature of an interface by its vibrational spectrum, and about the average molecular orientation, with sub-monolayer sensitivity.(2)This technique relies on broken inversion symmetry, which naturally occurs at interfaces between two isotropic media such as gases, liquids and a large number of solids. Initially we performed a detailed study of the anisotropy and polarization dependence of the SFG spectrum for the clean calcite surface, as this will serve as a reference to understand future results on calcite interaction with water, ions and oil. Afterwards, studies of surface cleaning (up to the last monolayer) by low salinity water rinsing of the rock surfaces contaminated by stearic acid, condensed oil and "dead oil" have been performed. Similar strategies have been reported with organic solvents instead of low salinity water.(3)We found that neither diluted sea water nor pure water rinsing were able to completely remove the adsorbed oil from calcite, so that a water-wet surface is not likely to occur in carbonate reservoirs upon LSWI. This explains the modest effect of LSWI and low values of total oil recovery (30%) for these "pre-salt" reservoirs. We plan to investigate different salt formulations for the injection water that may be capable of completely removing the organic contaminations from the rocks, thus enhancing oil recovery in these reservoirs.

Referências:

1 SOHRABI, M. *et al.* Novel Insights into mechanisms of oil recovery by use of low-salinity-water injection. **Society of Petroleum Engineers Journal** , v. 22, p. 407-16,2017.doi.org/10.2118/172778-PA. 2 SHEN,Y. R.Surfaces probed by nonlinear optics. **Surface Science,** v. 299-300, p. 551–562, 1994. 3 ZHENG, Y. *et al.* Binary solvents with ethanol for effective bBitumen displacement at solvent/mineral interfaces. **Energy Fuels,** v. 29, n.7, p. 4222-4226, 2015.

168

PG69
Plasmonic metasurfaces for enhanced chiroptical effects

SARRIA, J. J. H. ; SALAZAR, J. R. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.
jhon.hernandez@ifsc.usp.br

Plasmonic platforms exhibiting structural asymmetry are promising for applications in biosensing (1-2), telecommunications, metamaterials, and data processing. These structures have the ability to improve the light-polarization-effects through the strongly enhanced near-fields at the surface of subwavelength plasmonic building elements (1), thus being of great interest to enhance the inherently weak circular dichroism from biomolecules and drugs for chiral sensing.(3)In this work, we perform a comparative study (numerical) of circular dichroism from two-dimensional metasurfaces built by a periodic arrange of twisted plasmonic building elements, which are inherently chiral, and from an arrangement of Z-shaped nanoantennas, where plasmon hybridization through strong coupling is used to develop chiral-metamolecules.

Referências:

1 SARID, D.;CHALLENER, W. **Modern introduction to surface plasmons** . Cambridge: Cambridge University Press, 2010. 2 LOISEAU, A. *et al.* Silver-based plasmonic nanoparticles for and their use in biosensing. **Biosensors** ,v. 9, n.78, 2019. doi:10.3390/bios9020078 2019. 3 LEE, J.H. *et al.* Application of gold nanoparticle to plasmonic biosensors. **International Journal Molecular Science,** v.19, n.2021, 2018.; doi:10.3390/ijms19072021.

169

PG70
Equações integrais de Yang-Mills

MALAVAZZI, H. ; FERREIRA, L. A.
henrique.malavazzi@usp.br

Na história da humanidade, parte da nossa tecnologia foi desenvolvida através das leis do eletromagnetismo, também conhecidas como leis de Maxwell, sendo elas expressadas localmente. No entanto, estas leis foram primeiramente formuladas como leis integrais, ou seja, expressadas como fluxos e conhecidas como leis de Gauss, Faraday, etc. Com a formulação covariante do eletromagnetismo, foi possível expressar suas equações integrais fazendo uso do teorema de Stokes usando o formalismo de formas diferenciais. A compreensão do eletromagnetismo como uma teoria de *gauge* originada da mecânica quântica via simetrias locais, especificamente sob ação do grupo abeliano U(1), permitiu uma generalização para uma teoria de campos com simetrias locais não-abelianas, ou seja, uma teoria sob ação local do grupo SU(N), conhecida como teoria de campos de Yang-Mills,possibilitando descrições das interações fundamentais como as interações forte e fraca. Os campos de Yang-Mills foram apresentados, inicialmente, via equações locais (1) para a descrição de sua dinâmica, portanto, neste trabalho, estaremos interessados em compreender as expressões de fluxos para os campos de Yang-Mills.(2) Usaremos conceitos do espaço dos loops e a generalização do teorema de Stokes para grupos não-abelianos, resultando em integrais ordenadas no caminho. (2) Desta forma, obteremos as equações integrais dos campos de Yang-Mills (3) no espaço-tempo de (3+1)-dimensões que resumem a um espaço de integração de 3-dimensões. Um dos objetivos futuros do projeto de mestrado consistirá em fazer uso das equações integrais das teorias de Yang-Mills para obtenção de cargas conservadas dinamicamente (e não topologicamente) de soluções clássicas de monopolos magnéticos em teorias de *Gauge* assim como em teorias de grande unificação (GUT).

Referências:

1 OLIVE, D. **Lectures notes on Gauge theories and Lie algebras** : with some applications to spontaneous symmetry breaking and integrable dynamical systems. Singapore: World Scientific Publishing,1982. 2 ALVAREZ, O.; FERREIRA, L. A.; GUILLEN, J. S. A new approach to integrable theories in any dimension. **Nuclear Physics B** , v. 529, n. 3, p. 689-736, 1998. 3 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G. Gauge and integrable theories in loop spaces. **Nuclear Physics B** , v. 858, n. 2, p. 336-365, 2012.

170

PG71

Processamentos não-unitários de informação quântica e complexidade

MORAZOTTI, N. A. C. ; NAPOLITANO, R. J.
nicolas.morazotti@gmail.com

Em 2006, Nielsen *et al.* (1), interessados em computação quântica, publicaram um artigo que discute sobre a eficiência de algoritmos quânticos. À época, a dificuldade de se realizar o processamento era caracterizada pela quantidade de portas lógicas usadas pelo algoritmo. Usualmente, é dito que o algoritmo ótimo escala polinomialmente com o tamanho do problema. Em tal artigo, eles atacam o problema da seguinte maneira: podemos pensar no processamento de informação quântica ideal como o resultado de levar um estado inicial, $|A\rangle$ (input), a um estado final, $|B\rangle$ (output), a partir de $|B\rangle = U(t)|A\rangle$. $U(t)$ é gerado por algum Hamiltoniano $H(t)$ de acordo com a equação de Schrödinger $dU/dt = -iHU$, com a condição final $U(t_f) = U$. A dificuldade de realizar tal processamento é então descrita pelo custo $F(H(t))$. Esse custo, chamado posteriormente de *complexidade* por Brown e Susskind (2), é equivalente ao menor número de portas requeridas que reproduza o mesmo efeito que U. O problema de encontrar a complexidade é correspondente a encontrar uma geodésica; mas, mais importante para o trabalho em si, é computacionalmente conhecido como CVP (*closest vector problem*). Veja que a vaga maneira de se definir complexidade é válida apenas para processamentos quânticos unitários. Para tratar de complexidade de processos não-unitários, precisamos lançar mão da formulação operacional da mecânica quântica. Ao invés de tratar estados inicial e final como estados usuais, utilizamos espaços vetoriais distintos para preparações e medidas. Operações, nesta formulação, são descritas por mapas de Kraus, e assim podemos incluir a não-unitariedade. O objetivo do doutorado, a princípio, é conseguir unir os problemas discutidos aqui. Primeiramente, utilizaremos técnicas de *machine learning* para calcular a complexidade de algoritmos simples, como o de Deutsch e Jozsa (3), por exemplo. Então, com a linguagem operacional, expandiremos a aplicação para processamentos não-unitários.

Referências:

1 NIELSEN, M. A. *et al.* Quantum computation as geometry. **Science** , v. 311, n. 5764, p. 1133-1135, 2006. 2 BROWN, A. R.; SUSSKIND, L. Second law of quantum complexity. **Physical Review D** , v. 97, n. 8, p. 086015-1-086015-29, Apr. 2018. 3 DEUTSCH, D.; JOZSA, R. Rapid solution of problems by quantum computation. **Proceedings of the Royal Society of London A** , v. 439, n. 1907, p. 553-558, 1992.

171

PG72

Influência da heterogeneidade das características de tarefas na sua execução distribuída em redes complexas

LOPES, M. ; TRAVIESCO, G.

miguel.lopes.filho@usp.br

Diversos fenômenos consistem em entidades interagindo entre si, devido a isso, é comum utilizar redes complexas para modelá-los. (1) Desde redes de proteínas, até a sociedade humana, passando pela World Wide Web e a disseminação de doenças, muitas das dinâmicas presentes nestes sistemas podem ser reproduzidas com o uso de redes complexas. Porém, o mais interessante para este trabalho são as redes de distribuição de tarefas, as quais são compostas por agentes interligados que são responsáveis por executar tarefas e, quando necessário, delegá-las a outro componente da rede. Entretanto, os estudos deste fenômeno, em geral, encontram-se limitados quanto a homogeneidade das tarefas das quais os agentes são encarregados. (2-3) Este trabalho busca analisar as consequências quando as tarefas são heterogêneas nos seguintes pontos: diferença no tempo necessário para a conclusão da tarefa, denominada por heterogeneidade intrínseca, diferença nas taxas de produção de tarefas por cada um dos nós agentes, nós distintos podem produzir tarefas a taxas distintas, e tal foi denominado por heterogeneidade espacial, e por fim, diferenças nos intervalos de chegada de novas tarefas, denominada por heterogeneidade temporal. Tais heterogeneidades acabam por desbalancear a rede, tornando imprescindível a existência de uma distribuição de tarefas eficiente. Com isso, espera-se uma melhor compreensão de como as propriedades topológicas da rede influenciam na sua capacidade de lidar com essas heterogeneidades.

Referências:

1 COSTA, L. F. *et al.* Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks: a survey of applications. **Advances in Physics** , v. 60, n. 3, p. 329-412, 2011. 2 COSTA, L. F.; TRAVIESO, G.; RUGGIERO, C. A. Complex grid computing. **European Physical Journal B** , v. 44, n. 1, p. 119-128, 2005. 3 ISHII, R. P.; MELLO, R. F.; YANG, L. T. A complex network-based approach for job scheduling in grid environments. *In*: PERROTT, R. *et al.* (ed). **High performance computing and communications** . Berlin: Springer, 2007. p. 205-212. (Lecture notes in computer science, v. 4782).

172

PG73
Condensação de Bose-Einstein em superfície esférica

BERETA, S. J. ; CARACANHAS, M.
salviojacobbereta@yahoo.com.br

Um condensado de Bose-Einstein (BEC) consiste na ocupação macroscópica de partículas no estado fundamental, ou seja, no estado de mais baixa energia. O BEC foi inicialmente previsto por Einstein em 1925, utilizando um método estatístico introduzido por Satyendra Nath Bose. Segundo o artigo publicado por Einstein, quando um gás de bósons for resfriado abaixo de certa temperatura crítica, uma fração das partículas irá para o estado fundamental e formará um novo estado da matéria, diferente daqueles que já conhecemos (sólido, líquido e gasoso).(1)Neste pôster iremos discutir a formação do Condensado de Bose-Einstein (sigla em inglês: BEC) de gases atômicos confinados por armadilhas de diferentes formatos geométricos, caixa esférica e casca esférica.Para isso resolvemos a equação de Schrödinger para cada potencial com utilização de condição de contorno apropriada.Com base na solução de autovalores calculamos a densidade de estados de cada geometria. Trata-se de um conceito imprescindível para análise da formação do BEC, cujo valor foi comparado àquele esperado pela aproximação semi-clássica.Obtivemos que, para valores grandes de momento (alta energia dos átomos), a densidade de estado quântica tende ao valor da aproximação semi-clássica. Por outro lado, para o regime de baixas energias, que contempla os átomos do BEC, os resultados divergem do limite semi-clássico. Justificamos cada limite com a comparação das escalas de dimensão típicas do potencial com o comprimento de onda das partículas confinadas. Utilizamos dados experimentais para estimar uma temperatura de condensação, conhecida como temperatura crítica, para o caso particular do potencial de caixa e casca esféricas.(2)

Referências:

1 KETTERLE, W. When atoms behaves as waves:Bose-Einstein condensation and the atom laser. **ChemPhysChem,** v. 3, p.736-756, 2002. 2 BERETA, S. J.; MADEIRA,L.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S. **Bose-Einstein condensation in spherically symmetric traps.** 2019. Disponivel em:https://arxiv.org/abs/1903.07995. Acesso em: 27.06.2019.

173

PG74

Estudos estruturais sobre complexos de septinas humanas por MET

MENDONÇA, D. C. ; GUIMARÃES, S. L. ; GARRATT, R. C. ; ARAÚJO, A. P. U. ; PORTUGAL, R. V.

deborah.mendonca@usp.br

Septinas são proteínas da família das GTPases e estão envolvidas em uma série de processos intracelulares, incluindo divisão celular, tráfico de vesículas, exocitose, entre outros.(1) As septinas possuem a capacidade de interagirem com elas mesmas e polimerizar na forma de hetero-oligômeros, resultando em filamentos que subsequentemente se organizam em estruturas de mais alta ordem, porém o mecanismo de como essa associação ocorre ainda é desconhecido.(2) Essas proteínas são encontradas em vários eucariotos superiores, mas estão ausentes em plantas. Em seres humanos, foi observado que alterações nos níveis de expressão das septinas estão associadas com algumas patologias, como alguns tipos de câncer e doenças neurológicas.(1) Porém, há ainda muitas informações sobre tais moléculas não esclarecidas, como seu papel na hidrólise de GTP e mecanismo de ação. Portanto, 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) e foi sugerido que em altas concentrações salinas, o complexo se organiza em forma de hexâmero, com a SEPT7 se localizando nas duas extremidades. Utilizamos microscopia eletrônica de transmissão transmissão com análise de partículas únicas de amostras preparas por constrastação negativa para estudar um novo complexo de septina, SEPT5-SEPT6-SEPT7, para o qual não há informações estruturais disponíveis. A posição da SEPT5 no complexo foi acessada por sua fusão com MBP (Maltose Binding Protein) e imunolocalização com um anticorpo monoclonal anti-SEPT5. Nossos resultados mostram que a SEPT5 está localizada nas extremidades do complexo hexamérico. No entanto, SEPT5 pertence ao mesmo grupo que SEPT2, que é localizada no centro do hexâmero canônico SEPT2-SEPT6-SEPT7. Posteriormente, a mesma análise foi feita para SEPT2-SEPT6-SEPT7, mostrando que SEPT2 está também localizada nas extremidades do hexâmero, concordando com a posição SEPT5. Em conjunto, esses resultados levam a uma nova discussão sobre a forma como as septinas humanas formam heterocomplexos e também, no que diz respeito à sensibilidade das interfaces em relação à concentração de sal.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M., M. *et al.* Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature,** v. 449,p.311–117,2007. 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.

PG75

Estudo dos aspectos fundamentais da conjugação das terapias fotodinâmica e sonodinâmica para o tratamento de câncer de pele não-melanoma

AYALA, E. P. ; PRATAVIEIRA, S. ; BAGNATO, V. S. ; ALVES, F. ; GARCIA, M.
erikatoneth2021@gmail.com

A terapia fotodinâmica(TFD) foi adotada em diversos países como Estados Unidos, Rússia, Canada, Japão, Alemanha, França e Brasil no tratamento do câncer de pele não melanoma. (1) A TFD envolve três componentes principais: um fotossensibilizador, uma fonte de luz visível e oxigênio molecular, que juntos causam a morte de células cancerígenas, embora uma das limitações deste tratamento é a baixa penetração da luz em tumores de pele mais espessos. (2) Por outro lado, o ultrassom, também tem se mostrado uma fonte de excitação mecânica de moléculas que permite a ativação do sensibilizador em maior profundidade devido a sua boa penetração no tecido biológico e capacidade de sonoporação da membrana celular gerando morte celular de acordo com sua frequência e intensidade. (3) A técnica que usa ultrassom para ativar moléculas (sonosensibilizadores) é conhecida como terapia sonodinâmica (TSD). Este estudo está dividido em três fases: in vitro, in vivo e clínico, onde buscamos entender a sinergia e os detalhes de cada terapia para finalmente propor um novo protocolo de aplicação, desta técnica conjugada chamada terapia sono-fotodinâmica (TSFD), no tratamento de câncer de pele não melanoma. Para avaliar a eficácia da TSFD foram analisados os espectros de absorção do sensibilizador, Protoporfirina IX (5μM), o qual foi irradiado por duas fontes de excitação, luz vermelha (630 nm, 30-50 mW/cm^2) e ultrassom (1-2 W/cm^2, 50% do ciclo de trabalho) simultaneamente. As intensidades das fontes foram estabelecidas considerando o grado de degradação da PpIX e o incremento da temperatura para evitar efeitos térmicos. Os espectros de absorção de PpIX mostraram que a degradação do sensibilizador exposto ao TSFD é a soma da degradação da TSD e TFD. Estes resultados sugerem que o TSFD tem um efeito sinérgico podendo ter os mesmos resultados que a TFD em menor tempo de exposição, assim como obter um maior alcance e efetividade em lesões cancerígenas onde a TFD tem resultados parciais, no entanto tem que ser confirmado na próxima fase in vivo.

Referências:

1 BORISSEVITCH, I. E.; FERREIRA, L. P. **A luz na medicina moderna** : fotoquimioterapia. São Paulo: Livraria da Física, 2016. 2 MCEWAN, C. *et al.* Comparing the efficacy of photodynamic and sonodynamic therapy in non-melanoma and melanoma skin cancer. **Bioorganic and Medicinal Chemistry** , v. 24, n. 13, p. 3023-3028, 2016. 3 ESCOFFRE, J.-M. BOUAKAZ, A. (ed.) **Therapeutic ultrasound.** Cham: Springer, 2016. (Advances in Experimental Medicine and Biology, v. 880)

175

PG76

Efeito de decoerência devido a gravidade: uma abordagem por integral de trajetória

AFONSO, R. J. S. ; PINTO, D. O. S.
ricardo.afonso@ifsc.usp.br

A ciência da informação quântica é uma área do conhecimento de recente desenvolvimento. Ela se baseia no estudo da Física de propriedades quânticas de sistemas compostos que permitam novas formas de processar a informação, no entanto, a fragilidade aos efeitos de decoerência na maior parte dos recursos quânticos dificulta o desenvolvimento e entendimento de sistema quânticos aplicáveis à tecnologia. Neste projeto, estudamos o formalismo de integrais de trajetórias para sistemas quânticos, que possam ser identificáveis aos relógios quânticos, sob o efeito de decoerência. Primeiramente, revisamos o formalismo de integrais de trajetória para uma partícula livre passando por uma fenda simples, em seguida, adicionamos a gravidade no limite de campo fraco ao sistema e identicamos que a universalidade de queda livre é assegurada dentro da mecânica quântica, ao avaliarmos o padrão de interferência. Em seguida, utilizamos o formalismo de operador massa para separar o sistema quântico entre graus de liberdade interno e externo, como já descrito por ZYCH(1). Com isso, é possível identificar que no regime de mais baixa ordem relativística, isto é, no regime newtoniano, há uma interação dos graus de liberdade internos, no caso o spin, com os graus de liberdade externos, no caso a posição, ou seja, baseado nesses efeitos o padrão de interferência sofre decoerência e recoerência, devido a correlação entre spin e posição da partícula.(2) Ainda para esse contexto, pretendemos utilizar o formalismo de integrais de trajetória para abordar outros fenômenos quânticos, tais como a decoerência universal devido a presença de campo gravitacional em relógios quânticos, o efeito de dilatação temporal em mecânica quântica com abordagem operacional para uma possível descrição não perturbativa de efeitos de gravidade quântica.(3)Nosso projeto estende-se, não somente ao efeito da ação de campo gravitacional, mas também ao estudo do efeito de decoerência em quaisquer sistemas quânticos de interesse dentro do formalismo de integrais de trajetória. O resultado advindo deste formalismo para os sistemas, que ainda serão estudados, podem corroborar a exequibilidade deste projeto dentro da teoria de informação quântica.

Referências:

1 ZYCH, M. **Quantum system under gravitational time dilation** . New York: Springer International Publising,2017. 2 ORLANDO, P.J.; OLLOCK, F.A.; MODI, K. How does interference fall?. *In*: FANCHINI, F.; SOARES PINTO, D.; ADESSO, G. (eds.) **Lectures on general quantum correlations and their applications** ; Heilderg: Springer,.2017.(Quantum science and technology). 3 PIKOVSKI, I.: ZYCH, M.; COSTA F.; BRUKNER, C. Universal decoherence due to gravitational time dilation. **Nature Physics,** v.11,p.668,2015.doi:10.1038/nphys3366.

176

PG77

Up-conversion luminescence of tellurite glasses doped with rare-earth ions for white light emission

CALDERÓN, G. L. ; OTÁVIO, B. S. ; ROGÉRIA, R. G. ; ANTHONY, G. R. V. ; EUCLYDES, M. J.
glozano@usp.br

In recent years, rare-earth ions doped glasses have been widely studied for their luminescence properties, such as the near-infrared to visible light emission via up-conversion, which occurs when two or more low-energy photons generate the emission of photon energies higher than the initial light due to its non-linear dependence on incident light intensity. (1) Particularly, glass oxides (e.g., TeO_2 , SiO_2 and B_2O_3) are optically transparent for UV to NIR spectral range and their capability to incorporate high concentrations of rare-earth ions (2) and obtain coloured light emission, however, high efficiency has not been achieved. In this research, tellurite glasses doped with Er^{3+}, Tm^{3+} and Yb^{3+} were fabricated by conventional melt-quenching method and characterized by absorption spectroscopy, refractive index and up-conversion luminescence. Tuneable up-conversion emission was obtained by adjusting the laser excitation power at 976 nm and white light emission based on the colour mixing of red, green and blue light was observed. The balancing of the relative intensity of each colour is provided by the energy transfer process between the rare-earth ions.

Referências:

1 POLLNAU, M. *et al.* Power dependence of upconversion luminescence in lanthanide and transition-metal-ion systems. **Physical Review B** , v. 61, n. 5, p. 3337-3346, Feb. 2000. 2 PISARSKI, W. A. *et al.* Erbium-doped lead silicate glass for near-infrared emission and temperature-dependent up-conversion applications. **Opto-Electronics Review** , v. 25, n. 3, p. 238-241, 2017.

177

PG78
Simulating a Zeeman slower for Rb2 molecules

TORRES, M. L. ; PASSAGEM, H. F. ; CASIQUE, C. M. ; PAUL, E. C. ; CARDOSO, M. ; MARCASSA, L. G.

lefran@ifsc.usp.br

The development of cooling and trapping techniques for diatomic polar molecules is motivated by their wide range of potential applications, which are associated with their long-range dipole-dipole interaction and complex internal structure. Cold trapped polar molecules have also been proposed for quantum computation (1-2) as well as a simulator of strongly interacting quantum systems. (1,3) While such applications are all very exciting, the production of a cold and dense molecular sample is still very challenging. It would be very interesting if we could apply laser cooling technique directly into molecules. Unfortunately, until recently, laser cooling could not be applied directly to molecules because they generally do not possess suitable closed optical transitions, like in atomic systems. In this work, a theoretical study of the deceleration process of atoms and molecules was carried out using the Zeeman Slower technique. First, the results of simulations are presented to decelerate a beam of Rb atoms. Subsequently, a modification to the technique shown above for atoms is proposed to decelerate a supersonic beam of Rb2 molecules. Simulations were performed to decelerate the molecules using a theoretical magnetic field and a simulated magnetic field that represents an approximation of the field that we have in our laboratory. The results showed that it is feasible to decelerate a supersonic beam of Rb2 molecules in the laboratory with this new technique.

Referências:

1 ANDRÉ, A. *et al*. A coherent all-electrical interface between polar molecules and mesoscopic superconducting resonators. **Nature Physics** , v. 2, p. 636-642, Sept. 2006. doi: 10.1038/nphys386. 2 DEMILLE, D. Quantum computation with trapped polar molecules. **Physical Review Letters** , v. 88, n. 6, p. 067901-1-067901-4, Jan. 2002. 3 MICHELI, A.; BRENNEN, G. K.; ZOLLER, P. A toolbox for lattice spin models with polar molecules. **Nature Physics** , v. 2, p. 341-347, 2006. doi: 10.1038/nphys287.

178

PG79

Descoberta de derivados 4-quinolinonas como candidatos a fármacos antimaláricos: caracterização da atividade antiplasmodial in vitro, ex vivo e estudo de mecanismo de ação

SOUZA, J. O. ; ALMEIDA, S. ; AGUIAR, A. C. ; OLIVA, G. ; CORREA, A. ; GUIDO, R.
juliana2.souza@usp.br

Os derivados de quinolinona são uma classe de compostos de grande interesse para o desenvolvimento de compostos contra a malária, uma doença tropical causada por protozoários do gênero Plasmodium e que foi responsável por 219 milhões de mortes no ano de 2017. (1) Neste trabalho, uma série de novos derivados 4-quinolinonas foram sintetizados e avaliados como candidatos a composto líder para o desenvolvimento de novos antimaláricos. O foco do trabalho foi a caracterização da atividade antiplasmodial dos derivados 4-quinolinona contra os estágios sanguíneos assexuais de *Plasmodium falciparum* . Além disso, avaliamos a citotoxicidade e o potencial mecanismo de ação dessa série. Um total de 22 derivados de 4-quinolinona foram avaliados in vitro contra a cepa 3D7 de *P. falciparum* utilizando o ensaio SYBR *green* I. (2) Dois compostos, LSPN178 e LSPN182, foram identificados como inibidores potentes e seletivos (valores IC50 de 0,47 e 0,36 μM e índices de seletividade >213 e >278, respectivamente). Em seguida, investigamos a suscetibilidade de isolados clínicos de *P. falciparum* e *P. vivax* obtidos na Região Amazônica (Porto Velho, RO, Brasil) contra os inibidores. Ambos os compostos foram ativos contra *P. falciparum* na faixa submicromolar (mediana [variação] IC50: LSPN178, 0,58 µM [0,13 a 2,98 µM] e LSPN182, 0,49 µM [0,13 a 0,95 µM]). Quando testados em isolados de *P. vivax* , os valores de IC50 foram maiores do que aqueles observados contra isolados de P. falciparum (mediana [variação] IC50: LSPN178, 3,3 µM [1,5 a 2,2 µM]; e LSPN182, 1,5 µM [1,3 a 1,6 µM]), com significância estatística (p-valor de 0,03 e 0,04, respectivamente). Esta diferença pode ser devido ao modo de ação lento observado nesta série, além do menor tempo de incubação médio alcançado para amostras de *P. vivax* (30 h, contra 45 h para *P. falciparum*). Com o objetivo de explorar o mecanismo de ação desta série, avaliamos a atividade inibitória dos compostos LSPN 178 e 182 contra o citocromo bc1 de *P. falciparum* . Em paralelo, avaliamos a seletividade dessa inibição por meio da determinação do IC50 desses compostos contra o citocromo bc1 bovino. O LSPN182 foi um inibidor submicromolar seletivo do citocromo bc1 de P. falciparum, com um valor IC50 de 0,50 µM (IC95% 0,45 - 0,57 µM) e IS de >120. Por outro lado, o LSPN 178 teve IC50 de 7,22 μM (IC95% 5,1 - 8,0 μM) e não foi seletivo, com IS de 0,9. Nossos resultados sugerem que o LSPN182 é um candidato interessante para a descoberta de novos agentes antimaláricos, e novos testes com isolados de *P. vivax* estão sendo conduzidos de forma a otimizar o tempo de incubação.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World Malaria report 2018.** Geneva: WHO, 2018. Disponível em: https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/275867/9789241565653-eng.pdf. Acesso em: 24 jun. 2019. 2 SMILKSTEIN, M. *et al.* Simple and inexpensive fluorescence-based technique for high-throughput antimalarial drug screening. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy** , v. 48, n. 5, p. 1803-1806, May 2004.

179

PG80

Realistic g-factors and k.p parameters for III-V semiconductors from 14-band k.p Hamiltonian

BASTOS, C. M. O. ; SILVA, J. F. L. ; SIPAHI, G. M.

cmobastos@ifsc.usp.br

Recently, we developed a procedure to determine effective mass parameters from DFT calculations that provided realistic band structures for 8 $\times$ 8 k.p ZB Hamiltonians. (1-2) Although band structures reproduced the other methods up to 20 % of the First Brillouin Zone and the calculated g-factor are in agreement with literature for such Hamiltonians, the g-factors for small band gap materials are not realistic due to the proximity of bands which are not taken into account in the usual 8 $\times$ 8 k.p Hamiltonian. In this work we go further in the analysis of the g-factors by analyzing Hamiltonians with different number of states and approximation orders. Our goal is to determine if one can theoretically achieve realistic values also for g-factors by playing with the number of bands of the Hamiltonian using the Roth approximation (3) to a higher order, using also realistic Kane P0 and P1 interband interaction parameters.

Referências:

1 BASTOS, C. M. O. *et al.* Stability and accuracy control of k.p parameters. **Semiconductor Science and Technology** , v. 31, n. 10, p. 105002-1-105002-10, 2016. 2 BASTOS, C. M. O. *et al.* A comprehensive study of g-factors, elastic, structural and electronic properties of III-V semiconductors using hybrid-density functional theory. **Journal of Applied Physics** , v. 123, n. 6, p. 065702-1-065702-13, Feb. 2018. 3 ROTH, L. M.; LAX, B.; ZWERDLING, S. Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors. **Physical Review** , v. 114, n. 1, p. 90-104, Apr. 1959.

180

PG81

Estudo estrutural e funcional de hidrolases de glicosídeos celulossomais termofílicas envolvidas no processo de hidrólise de biomassa lignocelulósica

ALMEIDA, L. ; SILVA, W. ; MUNIZ, J.

al_leo@usp.br

O esgotamento das reservas de petróleo, a crescente demanda energética de países emergentes e a necessidade de redução da emissão de dióxido de carbono sinalizam a importância pela busca de novas fontes de energias renováveis. Contudo, para que tais fontes tenham um caráter de efetiva substituição e não apenas de complementação, se fazem obrigatórias pesquisas por novas formas de se obtê-la. Assim, a produção do bioetanol mediante a hidrólise de biomassas lignocelulósicas, como do bagaço de cana-de-açúcar, tem recebido grande destaque. (1) Devido ao seu potencial de evolução e redução de custos, a hidrólise enzimática da celulose pode ser uma peça fundamental para a produção de bioetanol de segunda geração a um custo competitivo em longo prazo.(2) Algumas bactérias termofílicas, como *Clostridium thermocellum* , produzem um complexo proteico multienzimático extracelular chamado celulossomo, que demonstra elevada capacidade de realizar uma eficiente degradação de biomassa celulósica, em especial na porção cristalina da celulose.(3) O objetivo principal desse projeto de pesquisa é caracterizar as enzimas β-glicosidases (BGls) celulossomais de *C. thermocellum* de diferentes famílias de hidrolases de glicosídeos (GHs), por meio de técnicas estruturais, bioquímicas e biofísicas. Parte disso já foi realizado até o momento para CtBGl1 e CtBGl3 (*C. thermocellum* BGL GH1 e GH3). E que isso permita comparar com outras BGls reportadas na literatura. Os genes CtBgl1A e CtBgl3B clonados, tiveram as proteínas expressas em *Escherichia coli* e até o momento apenas CtBGl3 foi purificada com sucesso após cromatografia de afinidade e de separação por massa molecular. A enzima purificada tem característica termofílica, mostrando alta atividade em temperatura acima de 60 °C em pH de 4,5-7,0. Apresentando maior atividade em pH 5,5 a 70 °C. Curiosamente apresentando temperatura de melting (tm) em 70 °C, determinados por meio de fluorimetria diferencial de varredura (DSF) e dicroísmo circular (CD). Além disso, teve avaliada sua atividade enzimática com os parâmetros: constante de Michaelis-Menten K_m = 0,45 (mM), constante catalítica k_{cat} = 201 (s^{-1}), e eficiência catalítica k_{cat}/K_m = 444 (mM^{-1} s^{-1}). A estrutura cristalográfica de CtBGl3 foi determinada por meio da difração de raios-X usando substituição molecular, com 2.34 [U+212B] de resolução, demonstrando um arranjo dimérico, indicadores da qualidade do refinamento R_{work} e R_{free}, respectivamente 0,21 e 0,24. Experimentos de espalhamentos de luz em múltiplos ângulos (MALS) e espalhamento de raios-X a baixo ângulos (SAXS) corroboram que em solução CtBGl3 também adota arranjo dimérico.

Referências:

1 LIU, J. *et al.* Systems integration for global sustainability. **Science** , v. 347, n. 6225, p. 963, 2015. 2 BORNSCHEUER, U. *et al.* Enzymatic degradation of (ligno)cellulose. **Angewandte Chemie,** v. 53, n. 41, p. 10876–93, 2014. 3 KAHN, A. *et al.* Evaluation of thermal stability of cellulosomal hydrolases and their complex formation. *In*: LUBECK, M. (ed.) **Cellulases** : methods and protocols. New York: Springer, 2018. p. 153–166.

PG82
Non-thermal quantum engine in transmon Qubits

CHERUBIM, C. ; BRITO, F. ; DEFFNER, S.
cleverson.cherubim@usp.br

Quantum thermodynamics (QT) is an emerging field of research (1) that aims to investigate how the laws of thermodynamics and quantum mechanics merge together in small quantum systems. With advances at the necessary technology to control and measure those small physical systems this field has acquired even more importance, not only in the sense that it can be tested, which is a good feature for basic research, but that new applications could be implemented at these scales, so a better comprehension of the limitations imposed by quantum thermodynamics turns out to be of a crucial importance for these goals, which forces theoreticians to produce experimentally relevant versions of these new concepts. Another important aspect present at those systems is that part of them work in a regime where its constituents are described by non-thermal states, in particular in non-thermal steady states, which brings to light a different thermodynamic description. One of the related subtopics that physicists deal with in QT and can possibly involve non-thermal stationary states is the physics of heat engines at the quantum domain, and one of the main features that this new regime could possibly allow, is the use of quantum resources as a way to overcome classical limitations imposed on its performance, like to attain efficiencies higher than Carnot's. This has generated a wave of ecstasy in the scientific community although it might be too soon to claim that these new features are true considering that people came up with results that apparently contradict it other. For instance, when dealing with non-thermal states, there is one result that tells us that the Carnot's efficiency cannot be overcomed (2) if we consider that part of the energy absorbed by the quantum working substance, known as ***housekeeping heat***, is used maintain its non-thermal stationary state. Another approach towards this issue is the distinction of the "heat"absorbed from the environment in two different types of energy, the variation in ***passive energy*** which is the part responsible for the changes in entropy, and variation in ***ergotropy***, that is a work-like energy that can be later extracted by means of a suitable unitary transformation. And in this case again, the irreversibility criterion to obtain the upper bound efficiency is different, because the ergotropy does not cause any entropy change. So in order to clarify the underlying physics of those systems in a non-thermal regime, any experimentally well suited content is more than welcome. So keeping that in mind we devised a experimentally relevant (3) thermodynamic cycle for a transmon qubit working substance (WS) interacting with a non-thermal environment composed by two subsystems, a externally excited cavity and a classical heat bath with temperature T. The WS undergoes a non-conventional cycle (different from Otto, Carnot, etc.) through a succession of non-thermal stationary states obtained by slowly varying its bare frequency and the amplitude of the field applied on the cavity. We calculate the the efficiency of this engine, obtaining its maximum value up to 47%. As a next step in this research we are studying what the presence of coherence in the WS can do to the efficiency of the engine and what order of coherence are the most important when it comes to change the behavior of the engine.

Referências:

1 BINDER, F. *et al.* (eds.) **Thermodynamics in the quantum regime:** fundamental aspects and new directions. Switzerland: Springer Nature, 2018. (Fundamental theories of physics,v.195) 2 GARDAS, B.; DEFFNER, S. Thermodynamic universality of quantum Carnot engines. **Pysical Review E**, v. 92, n. 4, p. 042126-1-042126-6, 2015. 3 ROUXINOL, F. *et al.* Measurements of nanoresonator-

qubit interactions in a hybrid quantum electromechanical system. **Nanotechnology** , v. 27, n.36, p.364003-1-364003,2016.

183

PG83

Desenvolvimento de um microscópio óptico sem lentes para análise de amostras semitransparentes

D'ALMEIDA, C. P. ; OLIVEIRA, N. P. ; FEITOSA, P. ; PRATAVIEIRA, S.
camila.paula.almeida@usp.br

O microscópio foi criado no século XVI, mas sua capacidade de ampliação visual tem sido tão importante que ainda faz com que equipamentos com versões similares às pioneiras continuem tendo seu espaço comercial e em bancadas de laboratórios de pesquisa e análise. No entanto, recentemente, novas possibilidades têm surgido como alternativa de uso para os microscópios ópticos tradicionais, como é o caso dos microscópios holográficos sem lentes. Esses últimos se destacam com relação aos primeiros por serem sistemas simples e portáteis, que permitem um amplo campo de visão não associado à resolução, podendo fazer imagem de fase, além de serem sistemas versáteis que são facilmente adaptados para uso em diversos tipos de ambientes. (1) Neste trabalho, apresentamos o desenvolvimento de um microscópio holográfico digital para amostras semitransparentes com campo de visão de aproximadamente 30 mm2 e resolução abaixo de 7 μm. A simplicidade desses sistemas se faz visível em suas construções. Para a montagem de nosso microscópio utilizamos um LED 455 nm (M455L2 - Thorlabs), um pinhole de 50 um de diâmetro (P50D - Thorlabs), um sensor digital de imagem CMOS (MT9J001 – Aptina) e um atuador (Z812B - Thorlabs). A imagem é feita por transmissão, de modo que a luz proveniente do LED passa pelo pinhole e atravessa a amostra linearmente antes de atingir o sensor. Este sensor é posicionado bem próximo à amostra (aproximadamente 1 mm), assim, o campo de visão se faz equivalente à área ativa do CMOS. A imagem capturada digitalmente é chamada holograma e corresponde ao padrão de interferência da luz que atravessa diretamente a amostra com a luz que interage com a mesma amostra. Essas imagens necessitam, portanto, de um processamento digital de recuperação da informação de fase, para que os objetos nela presentes possam ser vistos com clareza. Em nossa instrumentação, esse processamento é feito em Python, por um método chamado multialturas (2) que se utiliza de algumas imagens tiradas em diferentes distâncias amostra-sensor, as quais são obtidas com o auxílio da translação feita pelo atuador. Desenvolvemos, portanto, um microscópio holográfico sem lentes, capaz de fazer imagens com campo de visão de quase 30 mm2 de amostras semitransparentes e que utiliza um processamento digital desenvolvido em Python para a reconstrução dos hologramas capturados com o fim de obter imagens com resolução abaixo de 7 μm.

Referências:

1 OZCAN, A.; MCLEOD, E. Lensless imaging and sensing. **Annual Review of Biomedical Engineering** , v. 18, p. 77-102, 2016. doi: 10.1146/annurev-bioeng-092515-010849. 2 GREENBAUM, A.; OZCAN, A. Maskless imaging of dense samples using pixel super-resolution based multi-height lensfree on-chip microscopy. **Optics Express** , v. 20, n. 3, p. 3129-3143, 2012.

184

PG84

Estudos estruturais de uma possível lipase de Bacillus licheniformis

NAKAMURA, A. ; GODOY, A. ; KADOWAKI, M. ; POLIKARPOV, I.
alinemnk@gmail.com

Carboxilesterases são biocatalisadores amplamente utilizados em processos industriais devido a sua versatilidade enquanto mantém alta régio- e enantioseletividade, não necessitam de co-fatores e são estáveis em diversos solventes orgânicos.(1) Além disso, catalisam vários tipos de reações como esterificação, transesterificação, polimerização, lactonização, aminólise e oximólise fazendo com que sejam atuantes em diversos setores industriais. Bacillus licheniformis é um microrganismo frequentemente utilizado em diversos setores industriais e biotecnológicos, além de ser uma promissora fonte de esterases.(2) Apesar da relevância, nenhuma estrutura de carboxilesterase desse organismo foi registrada até o momento. A estrutura de BlEst2 foi determinada por faseamento experimental, utilizando átomos de iodo para a obtenção do sinal anômalo. O conjunto de dados foi indexado no grupo espacial ortorrômbico P212121, com duas moléculas preditas na unidade assimétrica. O modelo foi refinado até 2,0 Å de resolução com valores finais de Rwork/Rfree iguais a 0,19 e 0,22, apresentando uma cadeia polipeptídica do resíduo 28 ao 482, com 98% dentro da região favorável do diagrama de Ramachandran. BlEst2 apresenta uma estrutura composta por três domínios. O enovelamento α/β hidrolase, típico em carboxilesterases, é observado para o domínio I, sendo este o domínio catalítico, composto por uma folha β central circundado por 10 α hélices. Este domínio catalítico possui duas inserções localizadas em regiões conservadas entre α/β hidrolase, LI e LII, muito similar ao domínio lid comum em lipases, o que nos leva a acreditar que BlEst2 se classifica como lipase. As inserções, juntamente com os domínios adicionais II e III se acomodam sobre o core catalítico, cobrindo a tríade catalítica composta por Ser119, Asp231 e His254. Porém, BlEst2 difere muito de esterases/lipases quanto aos domínios II e III localizados no C-terminal, com nenhuma similaridade estrutural ou de sequência com outras enzimas dos bancos de dados. Uma análise das interações dos domínios II e III com o domínio I permitiu a formulação de uma hipótese de que eles servem como grampos, prendendo a inserção LI do domínio lid, bloqueando o sítio ativo e inativando a enzima. Os domínios II e III formam com o domínio catalítico uma interface de 1916 Å2, com oito pontes de hidrogênio entre eles, responsáveis pelo aprisionamento de LI. O linker que liga o domínio catalítico N-terminal aos dois domínios C-terminal possui dois sítios de clivagem para glutamil endopeptidase, uma protease presente em B. licheniformis. Para continuação dos estudos, pares de primers estão sendo desenhados para a análise bioquímica da enzima em sua possível forma ativa, sem os domínios II e III.

Referências:

1 KAPOOR, M.; GUPTA, M. N. Lipase promiscuity and its biochemical applications. **Process Biochemistry,** v. 47, n.4,p.555-569,2012 2 VEITH, B. *et al.* The complete genome sequence of Bacillus licheniformis DSM13, an organism with great industrial potential. **Journal of Molecular Microbiology and Biotechnology,** v.7, n.4,p.204-211,2004.

185

PG85

Phototherapy applied to cellulose and chitosan hydrogels in tissue engineering

ONO, B. A. ; JOHNS, M. ; COURTNEAY, J. ; SANTOS, D. M. ; BUZKEM, A. L. ; CAMPANA-FILHO, S. P. ; SHARMA, R. ; SCOTT, J. L. ; GUIMARÃES, F. E. G.

bruno.ono@usp.br

We are developing a low-cost scaffold of cellulose and chitosan for cell growth, which has antibacterial properties and do not use growth factors.(1) The quaternized chitosan with different linear density of positive charge and molecular weight is being searched and synthetized to help the interaction with cells, where similar results were acquired using chitosan.(2) Additionally, the opportunity to integrate the fields of Tissue Engineering and Phototherapy to promote synergistically the cell adhesion are been evaluated for using different wavelengths and fluences. This research is being carried out through national and international collaboration with researchers of University of Bath and São Carlos Institute of Chemistry. The first part of the project was to develop and characterize the material. The first stage of the project was developed at the University of Bath and the analyses and techniques to hydrogel development were made through FT-IR, Confocal Microcopy, Fluorescence Microscopy and RMN. The synthetized chitosan presented 40% and 8% degree of quaternization and a molecular weight around 400 and 900 kg/mol. Also, the hydrogel presented higher cell's attachment (near to 60%), low cytotoxicity and high cell spreading (median circularity of 0.2). This results was observed for human osteosarcoma cells (lineage MG-63) and hydrogel casted with 40% quaternized chitosan, which was similar to tissue culture plate. The gram-negative bacteria (E. coli) had the more damage at higher DQ material casted, however the same material presented the higher number of E. coli attach to it. Lines are being drawn above hydrogel using a microdrop InkJet printer loaded with chitosan solution to evaluate possible patterns creation and measuring size and penetration inside the hydrogel.(3) Also, the interaction with a non-cancerous cells of fibroblast are being tested with hydrogel too. The results so far have a high potential at the development of Tissue Engineering using natural sources of low cost and high technological impact.

Referências:

1 DAVIES, J. A.; CACHAT, E.Synthetic biology meets tissue engineering. **Biochemical Society Transaction,** v. 44, n. 3, p. 696–701, 2016. 2 JOHNS, M. A. *et al.* Predicting ligand-free cell attachment on next-generation cellulose–Chitosan hydrogels. **ACS Omega** , v. 3, n. 1, p. 937–945,2018. 3 COURTENAY, J. C. *et al.* Surface modified cellulose scaffolds for tissue engineering. **Cellulose,** v. 24, n. 1, p. 253–267, 2017.

PG86

Dynamics of matter waves undergoing Bloch oscillations in a ring cavity

BORGES, L. ; COURTEILLE, P. ; BACHELARD, R.

lucasgborges@usp.br

The main goal of this project is to study the synchronization of matter waves and the cooling potential of cold atomic clouds undergoing Bloch oscillations in an optical ring cavity, a setup which can be used as a gravity sensor. (1) While the proof-of-principle of the gravimeter concept has been demonstrated recently, investigating these phenomena will require the development of new analytical and numerical tools. In particular, parallel computation schemes will be particularly important to explore large timescales, which in turn allows studying the long-term stability of the gravimeter (and thus the precision of the sensing). The precise measurement of the gravitational field has important applications in various fields as it provides information on the composition of the environment, having important consequences in the field of oil prospection if drilling could be substituted by a non-invasive measurement. The first experiments of cold atomic clouds undergoing Bloch oscillations date back to the 90's and less than 10 years later the first measurements of gravity by that means were realized. (2) However, these experiments possessed the significant disadvantage of relying on a destructive measurement of the atomic cloud momentum, such that thousands of realizations have to be realized in order to produce a measurement with high precision. A potential solution to these issues was proposed recently by the collaborators of this project (1) based on the idea of using a ring cavity to harness continuously the light pulses resulting from the Bloch oscillations. This continuous measurement relies on a single realization, eliminating problems of fluctuations from shot to shot and reducing drastically the integration time.

Referências:

1 SAMOYLOVA, M. *et al.* Synchronization of Bloch oscillations by a ring cavity. **Optics Express** , v. 23, n. 11, p. 14823-14835, 2015. 2 FERRARI, G. *et al.* Long-lived Bloch oscillations with bosonic Sr atoms and application to gravity measurement at the micrometer scale. **Physical Review Letters** , v. 97, n. 6, p. 060402-1-060402-4, 2006.

187

PG87

.Simulação Monte Carlo dos efeitos microfísicos de radiações cósmicas ionizantes no DNA de seres vivos

AGUERA, J. J. M. ; GALANTE, D. ; MARINHO, F.

jonjulion@gmail.com

Os prótons são as principais partículas que constituem os Raios Cósmicos e o Vento Solar. Eles podem ser acelerados e adquirir energia cinética em fenômenos cósmicos galáticos(centros galácticos e quasares), estelares (Buracos Negros, Supernovas) e em nosso Sol por Ejeções de Massa Coronal(CME) e Eventos Solares de Prótons(SPEs).Quando estes prótons, após viajarem grandes distâncias, chegam em superfícies de planetas ou luas com a presença de bida biológica como conhecemos (baseada em Carbono e Água e codificada por DNA) podem assumir o papel de radiações ionizantes e causar danos sensíveis aos organismos vivos.Existem dois tipos principais de danos causados pelas colisões dos prótons com as moléculas de DNA que são os danos diretos (Quebra de fitas simples e duplas – SSBs , DSBs e Clusters de dano acumulado); e os danos indiretos (formações de espécies reativas do oxigênio(ROx).Os estudos dos efeitos das radiações têm sido feito por experimentos em células vivas e também por meio de simulações computacionais. Neste trabalho foram feitas apenas as simulações computacionais, utilizando um módulo plataforma de simulação Geant4, desenvolvida pelo CERN, chamada Geant4-DNA (1-3) que utiliza o método probabilístico de Monte Carlo para estimar os valores médios das quantidades associadas aos danos diretos e indiretos às moléculas de DNA.O Geant4 utiliza modelos análogos baseados em água líquida, com densidade 1,0 g/cm3, e realiza a simulação do bombardeio de prótons num alvo denominado phantom que são pequenas esferas preenchidas com água. Os danos diretos e indiretos são estimados para a deposição de energia na água e as condições da simulação permitem acessar o dano ao DNA.Os danos diretos foram calculados por meio de alguns algoritmos presentes nos pacotes de exemplos do Geant4-DNA, os algoritmos clustering e pdb4dna. As simulações foram feitas variando a energia dos prótons incidentes, chamados primários, entre 1keV e 10 meV e os valores médios das quebras simples e duplas (SSBs e DSBs) por partícula lançada foram obtidos pelo software de análise de dados chamado ROOT, que abre o output do Geant4.Além da energia cinética dos primários, também foram variados os raios dos phantoms para analisar a variação destes com o tamanho do alvo. Os danos indiretos foram calculados utilizando os algoritmos químicos chem1 e chem4, também presentes no pacote Geant4-DNA, que calculam as reações químicas que acontecem na água devido à passagem dos prótons. Estes algoritmos permitem calcular o fator radioquímico G, o número total de moléculas formadas e suas taxas de formação.Com os valores calculados pelas simulações, foram feitas modelagens matemáticas que permitem estimar os valores dos danos para energias diferentes das simulações, assim como visualizar as distribuições dos danos em função dos parâmetros analisados, energia e raio do phantom.Este modelos obtidos permitirão fazer previsões sobre os danos causados por fluxos de prótons estelares e de raios cósmicos, obtidos por satélites de observação como o ACE-Epham e também dados astronômicos. Estes modelos também serão importantes para ajudar na previsão dos danos causados a astronautas em missões espaciais, e também para analisar a habitabilidade de planetas como Marte, luas dos sistema solar como Encélados, Europa e Titã; e por fim em exoplanetas em outros sistemas solares.

Referências:

1 FRANCIS, Z. *et al.* Simulation of DNA damage clustering after proton irradiation using and adapted DBSCAN algorithm. **Computer Methods and Program in Biomedicine** , v. 101, n.3, p.265-

270,2011. 2 BERNAL, M.A. *et al*. Track structure modeling in liquid water: A review of the Geant4-DNA very low energy extension of the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit. **Physica Medica** ,v.31, n.8, p.861-874, 2015. 3 RAISALI, G. *et al*, Calculation of DNA strand breaks due to direct and indirect effects of Auger electrons from incorporated 123I and 125I radionuclides using the Geant4 computer code. **International Journal of Radiation Biology** , v.89, n.1, p.57–64, 2013.

189

PG88

Microfabricação com pulsos laser ultracurtos em materiais cristalinos

NOLASCO, L. K. ; ALMEIDA, G. F. B. ; MENDONÇA, C. R.
lucas.konaka.nolasco@usp.br

Materiais cristalinos apresentam propriedades ópticas que tem atraído o interesse de várias áreas para o desenvolvimento de uma grande diversidade de aplicações. (1-3) Em particular, suas propriedades ópticas não lineares como, por exemplo, a geração de segundo harmônico e o índice de refração não linear são de grande relevância para a área de fotônica. Desta forma, torna-se bastante interessante, tanto do ponto de vista básico quanto aplicado, desenvolver métodos capazes de microestruturar estes tipos de materiais, que venham a permitir sua aplicação em dispositivos. A intensidade luminosa de pulsos ultracurtos induz interações não lineares em materiais, de tal forma que alterações mediadas por estes processos fiquem confinadas ao volume de excitação, levando a formação de estruturas com distintas propriedades ópticas visando diversas aplicações. Desse modo, a microfabricação com pulsos laser de femtossegundos é uma ferramenta que tem se tornado bastante interessante para a micro/nanofabricação de materiais tanto para o desenvolvimento de dispositivos, quanto para o entendimento da interação da luz com a matéria em regimes intensos. Neste trabalho, pretendemos utilizar pulsos de femtossegundos para determinar as condições ótimas para a fabricação (energia de pulso, taxa de repetição do laser, velocidade de varredura e focalização) em materiais cristalinos (GaN, cristais de aminoácidos, e diamante), assim como produzir microestruturas (guias de onda 3D) com o objetivo de avaliar suas propriedades ópticas lineares e não lineares.

Referências:

1 ALMEIDA, G. F. B. *et al.* Incubation effect during laser micromachining of GaN films with femtosecond pulses. **Journal of Materials Science** , 2019. doi: 10.1007/s10854-019-01373-2. *In press.* 2 ALMEIDA, J. M. P. *et al.* Nonlinear optical spectrum of diamond at femtosecond regime. **Scientific Reports** , v. 7, p. 14320-1-14320-7, 2017. doi: 10.1038/s41598-017-14748-4. 3 PARTHENOPOULOS, D. A.; RENTZEPIS, P. M. 3-dimensional optical storage memory. **Science** , v. 245, n. 4920, p. 843-845, 1989.

190

PG89

The effect of Homeothermy in the evolution of minimal introns

ZUVANOV, L. ; DEMARCO, R.

luizazuvanov@usp.br

The homeothermy endothermy feature observed in avian reptiles and mammals might be one of the most important events during vertebrate evolution. The increase of body temperature arouse some genomes changes such as an increase in gene GC content, genome fragmentation into isochores and intron lengthening.(1) The study of introns in several organisms shows a bimodal distribution of length where one of those modes is around a minimal size that is species-specific. Introns that have sizes near this mode are named minimal introns.(2) In fact, in the genome of vertebrates, minimal introns are still present but do not show lengthening in response to temperature increase. In this study, we explored how those minimal introns were influenced by temperature changes through vertebrate evolution. Analysing the GC content of introns in human, we observed that minimal introns are divided into two defined populations of low and high GC% with peaks around 30% and 70% respectively. Long introns, on the other hand, do not show the same bimodal distribution, but a single GC% peak near the overall GC content of the genome. The same analysis was conducted for different vertebrates and showed that organisms displaying low temperatures have the majority of minimal introns in the low GC% population and that increase in body temperature shifts minimal introns into the high GC% population. Indeed, the population of high GC% minimal introns surpasses those of low GC% in mammals and birds. We speculate that minimal introns segregation might be a response to temperature increment. In order to check this hypothesis, we analysed minimal introns from genes enriched in the human testicles where the temperature is around 2 to 5 degrees Celcius below body temperature.(3) We noticed that the proportion of low GC% minimal introns population in testicles increases in relation to the analysis of the entire body. This appears to point out that the shift in GC content is connected to the temperature in which the transcription of the gene occurs. Interesting, the population of genes containing low GC% minimal introns in human is enriched by genes associated with cell cycle, DNA repair and mRNA splicing. Another intriguing observation caused by the bimodal distribution of the GC content of minimal introns is the scarce frequency of introns of intermediate GC content (around 40%). This may suggest that transcription or mRNA processing of these genes must be somehow affected. To better explored this observation, we calculated the percentage of intron retention (PIR) from RNA-Seq data. In this analysis, we noticed greater PIR values for those minimal introns of intermediate content. We speculate that the transition from low to high GC content may be limited by deleterious effects of a high level of intron retention in the intermediate state. In this manner, we hypothesize that some of the minimal introns population that retained low GC content might represent genes associated with essential processes for which production of miss-processed transcripts could impair proper cellular function.

Referências:

1 AMIT, M. *et al.* Differential GC content between exons and introns establishes distinct strategies of splice-site recognition. **Cell Reports,** v.1, n.5, p.543-556, 2012 2 YU, J. *et al.* Minimal introns are not "junk. **Genome Research,** v.12, n.8, p.1185-1189, 2002. 3 MIEUSSET, R.; BUJAN,L. Testicular heating and its possible contributions to male infertility: a review. **International Journal of Andrology,** v.18, n.4, p. 169-184,1995.

PG90

Investigação das metodologias de produção de Taq DNA polimerase Hot Start e suas implicações na atividade da enzima

TORRES, N. U. ; BERNARDES, A. ; COSTA, F. C. ; DOTTA, M. A. V. O. ; MALUF, F. V. ; GUIDO, R. V. C.

naiara.utimura@gmail.com

A reação de polimerização em cadeia (do inglês, PCR) é uma técnica muito usada em laboratórios de biologia molecular, análise forense, diagnóstico clínico e indústrias alimentícias. Taq DNA polimerase de *Thermus aquaticus* é a enzima mais amplamente usada na PCR, apesar de poder apresentar amplificações inespecíficas e formação de dímeros de oligonucleotídeos devido à sua atividade residual em temperatura ambiente, na qual a maioria das reações é preparada. (1-2) Para solucionar esse problema, foram desenvolvidas Taq DNA polimerases que são ativadas somente após uma incubação em alta temperatura (do inglês, *Hot Start Taq DNA polymerase*). Essas enzimas são, frequentemente, ligadas à biomoléculas ou grupamentos químicos que impedem a sua atividade a temperatura ambiente. Com a incubação em altas temperaturas, ou ciclo *Hot Start* , as biomoléculas ou grupamentos químicos se desligam da DNA polimerase, que recupera a sua atividade. (3) Apesar de muito utilizada, apenas um único tipo de Taq DNA polimerase *Hot Start* é produzida no Brasil, fazendo com que o valor e a disponibilidade dessa enzima sejam desfavoráveis. Dessa forma, esse trabalho – realizado em colaboração com a empresa Cellco Biotec do Brasil LTDA – visa à produção e o estudo de Taq DNA polimerases *Hot Start* de alta qualidade, por técnicas de mutagênese, ligação a anticorpo/aptâmero, reação com grupamentos químicos e precipitação de íons divalentes do meio reacional. Para isso, a Taq DNA polimerase foi produzida heterologamente em *Escherichia coli* e teve sua purificação otimizada através de quatro etapas cromatográficas. Para a produção das Taq DNA polimerases *Hot Start* por ligação a aptâmero e anticorpo, diluições de aptâmero de DNA e anticorpo foram misturados à enzima nativa. Na versão *Hot Start* por modificação química, derivados de anidrido maleico foram ligados covalentemente à enzima, em diversas proporções molares. Já no tampão *Hot Start* , foram testados agentes tamponantes com base em íons fostato que promovem a precipitação do cofator enzimático Mg+2. Após a otimização de cada metodologia, as DNA polimerases *Hot Start* foram comparadas em eficiência, sensibilidade, tamanho do fragmento amplificado, baixa atividade a 25 ºC, amplificação de fragmentos de DNA com alta porcentagem de GC, amplificações de genes de alta complexidade, desempenho em PCR multiplex e especificidade. Não foi observada a diminuição da atividade a 25 ºC na enzima mutante, enquanto que todas as outras mostraram-se *Hot Start* . A polimerase modificada quimicamente apresentou eficiência menor do que a enzima nativa. Todas as outras polimerases *Hot Start* apresentaram resultados semelhantes aos da enzima nativa, com destaque para o alto desempenho da enzima ligada à anticorpo em PCRs de DNAs ricos em GC e da enzima quimicamente modificada nos ensaios de especificidade e PCRs multiplex. Dessa forma, foi possível produzir diversas Taq DNA polimerases *Hot Start* e mapear as suas características para definir a melhor aplicação de cada enzima, o que irá ajudar a diminuir o custo e o prazo de entrega para a pesquisa e diagnóstico brasileiros.

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. 465-1-465-8, Aug. 2014. doi: 10.3389/fmicb.2014.00465. 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. 1550-1557, Sept. 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. e131-1-e131-18, Nov. 2008.

193

PG91

The 3-body problem with applications to astrophysics and cosmology

TAKEDA, C. S. ; HARTMANN, B.

carolina.takeda@usp.br

The recent detection of gravitational waves confirmed the existence of a binary black hole system. This fascinating experiment motivates the study of these systems and their surroundings. Although there is no analytical expression of a binary black hole system due to their dynamical character, it is possible to find some solutions with a static and axially symmetric spacetime. Some examples are the Weyl and the Majumdar-Papapetrou spacetime.(1) This work aims to study the three body problem and apply it in celestial objects. By first studying the problem in classical mechanics, its importance becomes clearer, since it has been studied for more than 300 years and has many applications in astrophysics and cosmology. Then, the study of general relativity was followed by focusing on the Majumdar-Papapetrou spacetime.(2) The solution found by Majumdar and Papapetrou can be interpreted as a system of charged black holes having their electric forces in equilibrium with the gravitational forces, just as in Newtonian theory with point charged particles in static equilibrium under their electrical and gravitational forces.(3) Finally, the current objective is to study a test particle in this spacetime, with two black holes.

Referências:

1 NAKASHI, K.; IGATA, T. **Innermost stable circular orbits in Majumdar–Papapetrou dihole spacetime.** 2019. Disponivel em:arXiv:1903.10121v1.Acesso em: 19.06.2019. 2 MAJUMDAR, S. D. A class of exact solutions of Einstein's field equations. **Physical Review** , v.72, n.5, p. 390,1947. 3 HARTLE, J. B.; HAWKING S. W. Solutions of the Einstein-Maxwell equations with many black holes. **Communications in Mathematical Physics,** v. 26, p.87–101, 1972. doi:10.1007/bf01645696.

PG92

Otimização de um protocolo para a triagem virtual de uma série de compostos que se ligam ao sítio da colchicina na α/β-tubulina

SALCEDO, D. L. P. ; MAGALHÃES, L. G. ; ANDRICOPULO, A. D.

palomino@ifsc.usp.br

Os microtúbulos são filamentos formados pela polimerização de α- e β-tubulina. Eles são essenciais para diferentes processos nas células eucariotas, além de serem componentes básicos do citoesqueleto. (1) Devido ao seu papel crucial na formação do fuso mitótico na divisão celular, os microtúbulos são um alvo atrativo para o desenvolvimento de candidatos a novos fármacos para o tratamento do câncer. Num trabalho anterior foi testado um protocolo baseado no análise de cluster para encontrar as conformações mais favoráveis por heterodímeros de α/β-tubulina a partir de simulações de dinâmica molecular na estrutura PDB-ID 5JCB. Com base nessas estruturas otimizadas foram realizados cálculos de docagem molecular para uma série de derivados de acridinona, testados no LQMC e com valores de IC50 conhecidos. (2) Com esse protocolo foi possível descartar compostos com baixa inibição, com uma porcentagem de 30% de falsos positivos e nenhum falso negativo. No presente trabalho, foi proposto otimizar o protocolo fazendo medidas de energia livre de ligação da mesma série de compostos com o sítio de ligação da colchicina da α/β-tubulina usando trajetórias de 100 ns de dinâmica molecular. Os resultados obtidos não permitem diferenciar entre compostos mais ou menos ativos. Contudo, ao serem feitas medidas de estabilidade estrutural do sítio de ligação destas mesmas trajetórias, foi possível descartar moléculas não inibidoras. Portanto, o protocolo se mostra útil para predizer a afinidade de novos compostos pelo sítio de ligação da colchicina da α/β-tubulina.

Referências:

1 PARKER, A. L. *et al*. An emerging role for tubulin isotypes in modulating cancer biology and chemotherapy resistance. **International Journal of Molecular Sciences** , v. 18, n. 7, p. 1434-1-1434-24, July 2017. 2 MAGALHÃES, L. G. *et al*. Discovery of a series of acridinonesas mechanism-based tubulin assembly inhibitors with anticancer activity. **PloS ONE** , v. 11, n. 8, p. e0160842-1-e0160842-17, Aug. 2016.

195

PG93

Hamiltonianos não hermitianos em eletrodinâmica quântica de cavidade

OLIVEIRA NETO, F. ; MOUSSA, M. H. Y.
foliveiraneto@usp.br

Entre os estudos de interação radiação-matéria, uma das mais importantes áreas é a engenharia de reservatório (1), que protege a coerência do sistema de interesse através da interação com um sistema auxiliar, reduzindo os efeitos do meio ambiente. Sua eficiência está diretamente relacionada à uma sofisticada técnica de manipulação da interação da radiação com a matéria, e é isso que a engenharia de hamiltonianos (2) utiliza a fim de modificar os efeitos do reservatório sobre o sistema de interesse, mediante interações auxiliares e aproximações associadas a regimes de parâmetros convenientes para a construção das interações efetivas desejadas. Muitos esforços têm sido feitos com o objetivo de obter-se hamiltonianos que levam aos sistemas que deseja-se estudar, como a obtenção de não linearidade do tipo Kerr no contexto de EQC, geração de dois átomos maximamente emaranhados ou engenheirar operadores de squeezing dentro da cavidade. Ao mesmo tempo, recentemente uma área vem crescendo se baseando em excelentes resultados, trata-se da mecânica quântica de Hamiltonianos com simetria de reflexão espaço-temporal (simetria PT). A Hermiticidade do Hamiltoniano sempre foi tratada como algo imprescindível na mecânica quântica devido a seus auto-valores reais e evolução unitária (conservação de probabilidade), no entanto a simetria PT também possui um regime no qual temos auto-valores reais e evolução unitária, com a vantagem de ampliar nosso conjunto de Hamiltonianos que satisfaçam essa simetria. Em 1998, Bender e Boettcher (3) abriram o caminho mostrando um regime onde, através do mapa de Dyson e de uma nova métrica, podemos hermitizar esses Hamiltonianos e trabalhar com eles da mesma maneira que estamos acostumados, inclusive calculando médias e valores esperados do Hamiltoniano original PT simétrico, através de novos operadores convenientemente construídos. Neste trabalho propomos um esquema de níveis, fazendo uso das técnicas de engenharia de Hamiltonianos efetivos de James e após impormos a simetria PT, obtemos um Hamiltoniano não hermitiano. A partir dele, mediante um mapa de Dyson construído especificamente para esse Hamiltoniano, geramos a sua contra-partida hermitiana. Em seguida, por meio da técnica de engenharia de reservatório, construímos sua equação mestra reduzida para a cavidade. Exibimos a comparação entre os Hamiltonianos e também suas equações mestra, além do histograma e representação no espaço de fase do estado obtido.

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, Dec. 1996. 2 JAMES, D. F.; JERKE, J. Effective hamiltonian theory and its applications in quantum information. **Canadian Journal of Physics** , v. 85, n. 6, p. 625-632, 2007. 3 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having PT symmetry. **Physical Review Letters** , v. 80, n. 24, p. 5243-5246, June 1998.

196

PG94

Estudo estrutural e funcional das proteínas spliceossomais U5-15K, U5-102K e Prp43 de Tripanossoma brucei

LIMA, A. L. ; SILVA, M. T. A. ; THIEMANN, O. H.
laura.ana.lima@gmail.com

A maioria dos genes dos eucariotos contém éxons e íntros. A retirada dos íntrons para formar o mRNA maduro é chamado *splicing* e consiste de duas reações de transesterificação catalisadas pelo spliceossomo. O spliceossomo é composto de cinco ribonucleoproteínas U1, U2, U4/U6 e U5. Foi visto que a U5102K forma um subcomplexo com a U515K e é importante para a formação de um complexo chamado U4/U6.U5 trisnRNP.(1) O estudo desse complexo em levedura mostrou que a Dib1(U515K) tem uma localização central no U4/U6.U5 trisnRNP, associando-se ao U5 snRNA, ao pré mRNA e ao domínio N terminal da Prp8. Tanto a Dib1 quanto a Prp8 estão associadas a estabilização do *hairpin* formado pela parte invariante do U6 snRNA e estudos recentes sugerem que a Dib1 bloqueia a formação de interações RNA-RNA e proíbe a interação dos componentes do NTC e os movimentos das proteínas para a formação do complexo B ativado.(2)Já a Prp43 é uma helicase que atua no final do processo de *splicing* , participando da desmontagem do spliceossomo.(3) Esse trabalho tem por objetivo o estudo do *trans splicing* em *T. brucei* , mais especificamente, o estudo estrutural e funcional das proteínas específicas da partícula U5 snRNP, U515K e U5102K e da proteína Prp43. Para o estudo estrutural da U515K, foram feitas mutações sitio dirigidas em sua alça flexível (U515K truncada), a proteína foi purificada por afinidade, seu enovelamento foi avaliado por Dicroísmo Circular e Fluorimetria Diferencial de Varredura e foram feitos testes de cristalização. Para o estudo dos efeitos da autoclivagem, foram realizadas mutações independentes nas quatro serinas do C terminal e uma na região do ponto de clivagem. Também foi feita a clonagem da U5102K e da Prp43 em pc_PTP_neo para estudos de parceiros de interação e de uma porção do N terminal da U5102K em pET SUMO para o estudo da interação dessa proteína com a U515K. As mutantes foram expressas em Bl21 (DE3), foi feita a purificação por afinidade e seus enovelamentos foram avaliados por Fluorimetria Diferencial de Varredura. Os testes de clivagem com as mutantes mostraram que apenas a substituição da serina 137 apresentou inibição da autoglivagem, sugerindo que ela seja o resíduo catalítico. Na mutante U515Kpc foi vista a manutenção da atividade de clivagem, o que sugere que a clivagem ocorra na alanina que não foi modificada e que a substituição dos aminoácidos ao seu redor por alaninas não interfira nessa atividade. Também foram realizados testes de criatalização com a mutante U515K137A. Nenhum dos testes resultou na formação de cristais. Quanto ao estudo do subcomplexo 15K-102K, o N terminal da U5102K foi expresso em BL21 (DE3) e foi feita a purificação por afinidade, tentou-se visualizar a interação com a U515K por gel nativo, mas os resultados foram inconclusivos. A purificação dos parceiros de interação da U5102K pela técnica de PTPtag não mostrou novas proteínas, já o experimento com a Prp43 resultou na identificação da Ntr1. Mais experimentos devem ser feitos com a Ntr1 para avaliar sua participação no *trans splicing* .

Referências:

1 DA 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 SCHREIB, C. C. *et al*. Functional and biochemical characterization ofDib1's role in pre-messenger RNA splicing. **Journal of Molecular Biology** , v. 430, n. 11, p. 1640-1651, 2018. 3 FOURMANN, J. B. *et al*. Regulation of

197

Prp43-mediated disassembly of spliceosomes by its cofactors Ntr1 and Ntr2. **Nucleic Acids Research** , v. 45, n. 7, p. 4068-4080, 2017.

198

PG95

Techiniques of Optical Trapping Through Generalized Phase Constrast

SILVA, P. ; SEGURA, C. ; MARTINS, T. ; MUNIZ, S.
pedro.faleiros.silva@usp.br

The motivation of this project is to develop experimental techniques of optical trapping and optical control applicable to atomic physics and nanotweezers as a platform to study important contemporary problems of modern physics and technology - which is in the context of the generation of arbitrary optical potentials to simulate out-of-equilibrium systems, coherent control of qubits, and quantum simulation. In particular, in this project has been studied the spatial modulation of light by the Generalized Phase Contrast (GPC) technique, to produce with high precision different optical potentials. Unlike the more well-known technique of holography, the GPC can produce very sharp potentials without speckles and that allows a single pixel control through a single path interferometer. (1) Basically, the GPC works creating a phase-shift in the zero spatial frequency components of the laser beam modulated in a Spatial Light Modulator (SLM) and building a interferogram through a 4f optical correlator. (1-2) In this context, will be shown our first results with a preliminary technique of GPC, known as Zeroth-Order technique, wich has the same optical system and works creatting a high precision amplitude mask through phase control of the light. (2) In both cases our main goals include the comparison of this techniques with holography, build an automated system for the potentials control and make a quantitative study of GPC and its derivations for optical trapping.

Referências:

1 BAÑAS, A.; GLÜCKSTAD, J. Light shapping with holography, GPC and holo-GPC. **Optical Data Processing and Storage** , v. 3, n. 1, p. 20-40, 2017. 2 PIZOLATO, J. *et al.* Zeroth-order phase-contrast technique. **Applied Optics** , v. 46, n. 31, p. 7604-7613, 2007.

199

PG96

Photodynamic inactivation in a molecular-level: a Langmuir monolayer approach

JOCHELAVICIUS, K. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.
karen.jochelavicius@usp.br

The number of antibiotic resistant bacteria is growing faster than the discovery of new drugs, which concerns global health authorities and points to the need of new types of therapies. In this scenario, photodynamic inactivation (PDI) is gaining attention because bacteria are unlikely to develop resistance against it, and because it exhibits a broad-spectrum nature. (1) The PDI effectiveness relies on the action of a photosensitizer (PS) when irradiated in a certain wavelength, once it is close to an adequate molecular target. To be applied in public health, therefore, it requires a careful study in order to determine the means of action of each PS, including molecular targets, providing high selectivity and minimizing toxicity. Although little information is available about it, it is suggested that the cell membrane is a key site for PDI. (2) In this study, Langmuir monolayers made with *Escherichia coli* total lipid extract were used as a membrane mimetic system to investigate the action of curcumin. This PS is known to be effective against bacteria after photoactivated. (3) Curcumin was found to affect the lipids in the Langmuir monolayer, but *in situ* blue LED irradiation did not produce significant changes in the film stability or surface potential under the pressure of 30 mN/m. Similar results with negligible influence of LED irradiation were observed for Langmuir monolayers of the synthetic lipids di-octadecyl phosphatidyl ethalonamine (DOPE), palmitoyl-octadecyl phosphoglycerol (POPG) and cardiolipin, which are common in bacteria. Therefore, the molecular targets for curcumin in PDI appear to be other types of molecules. In contrast, light-irradiation effects were observed in curcumin-containing monolayers of di-octadecyl phosphatidyl choline (DOPC), which is frequent in mammal cell membranes. In the latter case, the DOPC monolayer surface potential decreased upon incorporating curcumin, but then increased under blue LED irradiation. These results point to the need of further studies to understand the molecular mechanisms responsible for the action of curcumin.

Referências:

1 HAMBLIN, M. R.; ABRAHAMSE, H. Can light-based approaches overcome antimicrobial resistance? **Drug Development Research** , v. 80, n. 1, p. 48-67, 2019. 2 AWAD, M. M. *et al*. Important cellular targets for antimicrobial photodynamic therapy. **Applied Microbiology and Biotechnology** , v. 100, n. 17, p. 7679-7688, 2016. 3 PENHA, C. B. *et al*. Photodynamic inactivation of foodborne and food spoilage bacteria by curcumin. **LWT - Food Science and Technology** , v. 76, Part B, p. 198-202, Mar. 2017.

200

PG97
Propriedades termodinâmicas de horizontes causais

BARBOSA, M. ; VANZELLA, D.
matheusgb@ifsc.usp.br

Nas últimas décadas foram obtidos resultados que sugerem uma forte conexão entre as leis da termodinâmica e da gravitação. O mais importante e bem estabelecido destes é a formulação da chamada termodinâmica de buracos negros (1), a qual estabelece leis para a evolução de espaços-tempo contendo buracos negros a partir de parâmetros físicos associados ao horizonte de eventos, sendo que estas leis e parâmetros fornecem uma analogia direta e explícita com as leis e quantidades termodinâmicas. Baseados nessa analogia, outros estudos foram feitos na tentativa de generalizá-la para outras superfícies, além de horizontes de eventos, como horizontes causais (2) e telas holográficas (3). Considerando que muitos resultados da termodinâmica de buracos negros surgiram de uma descrição puramente clássica, utilizando argumentos geométricos e que os estudos relativos a horizontes causais carecem ainda de uma melhor formulação matemática, neste trabalho serão estudados tais horizontes, descritos por hipersuperfícies nulas contidas em espaços-tempo genéricos. Um dos pontos a serem analisados é como descrever tensores de curvatura a partir de valores iniciais em uma dada seção de hipersuperfície nula, já que tal descrição pode ter importância comparável à equação de Raychaudhuri no caso de horizontes de eventos. Além disso, será examinada a possibilidade de formalizar a equivalência, sugerida em (2), entre a entropia de uma dada região do espaço-tempo e a área do horizonte causal na fronteira desta região. Especificamente, será estudada a formulação lagrangiana da relatividade geral aplicada a hipersuperfícies nulas, as quais definem o passado causal de um dado ponto do espaço-tempo, e a possibilidade de utilizar o teorema de Stokes generalizado para obter uma função associada ao horizonte causal que seja extremizada juntamente com a ação de Einstein-Hilbert.

Referências:

1 BARDEEN, J. M.; CARTER, B.; HAWKING, S. W. The four laws of black hole mechanics. **Communications in Mathematical Physics** , v. 31, n. 2, p. 161-170, June 1973. 2 JACOBSON, T. Thermodynamics of spacetime: the Einstein equation of state. **Physical Review Letters** , v. 75, n. 7, p. 1260-1263, Aug. 1995. 3 VERLINDE, E. On the origin of gravity and the laws of Newton. **Journal of High Energy Physics** , v. 2011, n. 4, p. 29-1-29-26, Apr. 2011.

201

PG98

Toward a continuous observation of Bloch oscillations of ultracold atoms

MORENO, M. ; KESSLER, H. ; BELI, C. ; SHIOZAKI, R. ; COURTEILLE, P.
michelle.moreno@ifsc.usp.br

Methods borrowed from atomic interferometry promise great advances in the development of inertial sensors. One particularly attractive technique translates the gravitational acceleration force into a measurement of the frequency of Bloch oscillations of laser-cooled atoms confined in a vertical stationary light wave. In modern gravimeters, the measurement is destructive and new atomic samples must be prepared for each choice of evolution time. To overcome these destructive measurements, we propose to study a new technique that allows monitoring in vivo Bloch oscillations of strontium atoms. Two key ingredients based on different physical phenomena are needed to implement continuous monitoring. The first one is the phenomenon of Bloch oscillations. These oscillations, observed in the movement of cooled atoms at temperatures below the photonic recoil limit, placed within a stationary light wave and subjected to an external force, occur at a frequency strictly proportional to the acceleration. (1) The second ingredient is Collective Atomic Recoil Laser (CARL). This effect is observed with cold atoms interacting with two counterpropagating modes of a ring cavity. (2) It is due to the conversion of kinetic energy from atoms used to create a field of laser radiation containing information about atomic motion. The created field serves as a non-destructive and continuous proof of the dynamics of wave-matter and the inertial forces which it is subjected. (3) Optical cooling of strontium is performed in a two-step process. So far, the first phase has been implemented and we are working on the second. In the first phase, strontium $^1S_0 -^1 P_1$ at 461 nm, with 32 MHz line width. When trap is loaded with sufficient number of atoms, the laser beams of this (blue) MOT are turned off and the second phase starts, which consists of a (red) MOT operated at the narrow $^1S_0 -^3 P_1$ intercombination line of 7.6 kHz at 689 nm. Temperatures around 1 μK should be attained. Now, laser beams near the resonance at 689 nm are injected into the two counterpropagating modes of the cavity. They form a standing wave interacting with the atoms. Within this wave the atoms perform Bloch oscillations that can be continuously monitored by beating the light fields leaking from the cavity and superimposed on a photodetector.

Referências:

1 FERRARI, G. *et al.* Long-lived Bloch oscillations with Bosonic Sr atoms and application to gravity measurement at the micrometer scale. **Physical Review Letters** , v. 97,n. 6, p. 060402-1-060402-4, Aug. 2006. 2 SAMOYLOVA, M. *et al.* Synchronization of Bloch oscillations by a ring cavity. **Optics Express** , v. 23, n.11, p. 14823-14835, 2015. 3 SAMOYLOVA, M. *et al.* Mode-locked Bloch oscillations in a ring cavity. **Laser Physics Letters** , v. 11, n. 12, p. 126005-1-126005-7, Dec. 2014.

202

PG99

Expressão e purificação das septinas de levedura Cdc3, Cdc10, Cdc11 e Cdc12

GARRATT, R. C. ; SILVA, R. M.
rafael_msilva@usp.br

Septinas são proteínas que podem polimerizar em filamentos não polares e que estão relacionadas ao ciclo de divisão celular, estas descritas pela primeira vez em células de levedura por Hartwell (1971). Elas são amplamente conhecidas por sua atividade GTPase, embora algumas septinas tenham perdido esta função ao longo da evolução. Apesar de terem sido descobertas em leveduras, as septinas podem ser encontradas em uma miríade de organismos vivos muito diferentes, como algas, protozoários, vermes e mamíferos, com notável exceção as plantas.(1) Nos seres humanos, defeitos ligados a essas proteínas estão relacionados a doenças como câncer, Alzheimer e Parkinson.(2) Em leveduras, as septinas polimerizam em heterooctâmeros compostos por quatro septinas diferentes que se repetem na seguinte ordem: Cdc11-Cdc12-Cdc3-Cdc10-Cdc10-Cdc3-Cdc12-Cdc11.(3) O presente trabalho tem como objetivo a expressão heteróloga do domínio GTPase destas quatro septinas seguida de etapas de purificação. A expressão das proteínas se deu em células de *Escherichia coli* da cepa Rosetta (DE3) após terem sido transformadas com o plasmídeo pET-15b contendo o gene de interesse. Após expressão utilizando IPTG como indutor por 16 horas, as células foram rompidas por pulsos de sonicação. A purificação foi feita com o uso de uma coluna de níquel através da afinidade das proteínas pela resina, proteínas estas marcadas com uma cauda de histidina (6x his). Numa etapa complementar, essas amostras foram purificadas por um sistema de exclusão molecular utilizando um sistema AKTA. A identificação das proteínas foi feita com base em gel SDS-PAGE e Cromatograma de Exclusão Molecular. Ensaios de cristalização em diferentes condições e combinações destas quatro proteínas, para futura determinação da estrutura cristalográfica, estão inseridas no projeto. A compreensão de como as septinas interagem em filamentos de organismos basais pode elucidar os mecanismos por trás de sua polimerização em outros organismos, fornecendo uma nova abordagem para entender a condição humana.

Referências:

1 PAN, F.; MALMBERG, R.; MOMANY, M. Analysis of septins across kingdoms reveals orthology and new motifs. **BMC Evolutionary Biology** , v.7,n.103,2017.doi: 103,007.10.1186/1471-2148-7-103 2 HALL, P. A. ; RUSSELL, S. E. The pathobiology of the septin gene family. **Journal of Pathology,** v.204,n.4, p. 489–505 2004. 3 BERTIN, A. *et al.* Saccharomyces cerevisiae septins: supramolecular organization of heterooligomers and the mechanism of filament assembly. **Proceedings of the National Academy** , v.105, n.24, p.8274–8279,2008.

203

PG100

Stochastic analysis and inference for oscillating chemical reaction networks using the linear noise approximation

ARAUJO, G. ; MAIA, L.
guilherme.david.araujo@gmail.com

A chemical reaction network (CRN) is a framework for mathematical modeling of the dynamical behavior of reaction systems with a wide range of applications. (1) The theory aims at modeling concentration of species subject to a set of reactions altering the state space, concerning with the dynamics resulting from the network topology. For many systems, especially in a biochemical context, low count numbers of species result on higher importance of stochasticity, with deterministic models failing to describe the system. Stochastic analysis of CRNs is performed with continuous time Markov process models, giving a forward Kolmogorov equation, or a chemical master equation (CME), for the time evolution of densities. In a nonlinear context, CMEs can always be simulated by stochastic simulation algorithms but usually are analytically intractable. To understand structural behavior and systems' motifs, we can then make approximations. The linear noise approximation is a first order systematic expansion on the system's size that gives a Gaussian, linearized, evolution of systems' densities and is similar to Langevin approximations of the CME. (2) This framework gives a complete and tractable model for the system, where we can obtain approximate dynamical behavior, moments and steady-states, but lacks a rigorous connection to measurements (often incomplete and obscured by undetermined noise). We can address this by using a measurement model and applying inference and filtering theory to extract estimates for parameters and hidden states from observation, using densities conditioned on measurements. (3) Our work is especially concerned with methodology development and application of this framework of analysis and inference to oscillating networks, in particular to the context of genetic and circadian systems. Usually, approximation and inference methods need to be adapted or extended to grant more accuracy or robustness of analysis for specific behaviors and network structures. As a practical example and application system, we consider the stochastic form of the Goodwin oscillator, a model for biochemical oscillations that can be considered as the simplest topology of feedback loop capable of undergoing sustained oscillations via limit cycles (past a Hopf bifurcation point).

Referências:

1 SCHNOERR, D.; SANGUINETTI, G.; GRIMA, R. Approximation and inference methods for stochastic biochemical kinetics: a tutorial review. **Journal of Physics A** , v. 50, n. 9, p. 093001-1-093001-60, 2017. 2 van KAMPEN, N. G. **Stochastic processes in physics and chemistry** . Amsterdam: Elsevier. 1992. v. 1. 3 SÄRKKÄ, S. **Bayesian filtering and smoothing** . Cambridge: Cambridge University Press, 2013. (Institute of Mathematical Statistics Textbooks, 3).

204

PG101

Estudos estruturais e biofísicos de RAD51 e seus parálogos de Leishmania

LEÃO, M. ; THIEMANN, O. H.
murilo.leao.pereira@gmail.com

O ADN (ácido desoxirribonucleico) é uma molécula essencial por ser responsável por carregar todo o material genético da maioria dos organismos vivos. Portanto, é natural que, durante a evolução, tenham sido desenvolvidos mecanismos que sejam capazes de reparar essa molécula para manter a integridade do seu conteúdo. Entre as vias criadas, uma em especial faz uso de busca de fita homóloga e invasão de filamento, chamada recombinação homóloga. Esta atua em ocasiões de quebra da fita dupla, utilizando a cromátide irmã como modelo para formação de nova fita e, por conseguinte, do reparo no ADN. (1) Dentro da maquinaria da recombinação homóloga, um dos fatores de maior importância é a RAD51 e seus parálogos. O interesse nestes deriva de indícios que mutandes de parálogos de RAD51 possuem instabilidade cromossômica, retardo de crescimento e dimunição de formação de focos de RAD51 após danos no ADN. Há ainda sugestões atuais que os parálogos de RAD51 são fundamentais para conduzir o reparo recombinacional, agindo no início e no final da recombinação. No entanto, funções individuais desses elementos permanecem difíceis de avaliar. (2) Mais especificamente, em Trypanosomatidae, a recombinação homóloga já foi reportada como atuante na variação antigênica em *Trypanosoma brucei* e como catalisadora da amplificação do DNA através de rearranjos do genoma em Leishmania, sendo estas envolvidas em estratégias de resistência a drogas. (3) Ademais, essa maquinaria é bem conservada na família, sendo viável tratar o estudo de Rad51 de uma espécie específica para o grupo como um todo. Em particular, a interação entre Rad51 e seus parálogos de *Leishmania infantum* já foi demonstrada bioquimicamente e há indícios que estes elementos promovem a recombinação homóloga e a interação e ligação ao ADN. Entretanto, ainda não foi reportada a caracterização estrutural e biofísica dos parálogos de RAD51 de Trypanosomatidae. Portanto, este projeto propõe o estudo estrutural, por microscopia eletrônica de contraste negativo e crio-microscopia eletrônica, dos complexos de LiRad51 (Rad51 de L. infantum) e seus parálogos, assim como o estudo da cinética e estequiometria de ligação desas proteínas entre si e com DNA e ssDNA.

Referências:

1 WEST, S. C. Molecular views of recombination proteins and their control. **Nature Reviews Molecular Cell Biology** , v. 4, n. 6, p. 435-445, June 2003. 2 LIN, Z. *et al*. Origins and evolution of the recA/RAD51 gene family: evidence for ancient gene duplication and endosymbiotic gene transfer. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America** , v. 103, n. 27, p. 10328-10333, July 2006. 3 UBEDA, J. M. *et al*. Modulation of gene expression in drug resistant Leishmania is associated with gene amplification, gene deletion and chromosome aneuploidy. **Genome Biology** , v. 9, n. 7, p. R115.1-R115.16, July 2008.

205

PG102
Comparing the performance of imitative learning algorithm

AQUINO, L.
larissaaquino@ifsc.usp.br

Genetic Algorithms (GAs) are non-deterministic search procedures based on the mechanisms of natural selection and genetics. They have been widely used for solving optimization problems in many contexts, such as physics, computer science and biology. An alternative probabilistic search procedures is based on social interactions like cooperation between the agents realizing the search process. In this context, we have the imitative learning algorithm that consists of a group of agents (represented by a set of strings) modifying its features (a bit of the string) to copy a random feature from the individual with highest fitness in the group. In a previous research (1), the performance of imitative learning algorithm was quantitatively, analyzed by measuring its average computational cost, which is defined as the product of the number of agents in the group and the number of trials they did until one of them finds the global maximum. Our goal in this research is to compare imitative learning performance with the performance of the sexual and asexual GAs. In order to do this, we will measure for both algorithms the average computational cost that is required for finding the global maximum in a rugged fitness landscape with varying complexity degrees generated using the NK model.

Referências:

1 FONTANARI, J. F. Exploring NK fitness landscapes using imitative learning. **European Physical Journal B** , v. 88, p. 251-1-251-7, Oct. 2015. doi: 10.1140/epjb/e2015-60608-1.

206

PG103

Avaliação dos efeitos fotodinâmicos de fotossensibilizadores naturais no desenvolvimento do Aedes aegypti em condições subletais

MEZZACAPPO, N. F. ; SOUZA, L. M. ; GARBUIO, M. ; INADA, N. M. ; BAGNATO, V. S.
natasha.mezz@gmail.com

A transmissão de doenças como dengue, febre amarela, Chikungunya e Zika têm sido um grande problema em território nacional nos últimos anos, com altos números de casos prováveis.(1) Essas doenças são transmitidas através da picada das fêmeas do gênero *Aedes* , sendo que somente para febre amarela existe vacina preventiva atualmente. O controle vetorial tem sido feito majoritariamente por meio de inseticidas químicos, como organofosforados, piretróides e carbamatos, o que levou ao desenvolvimento de populações resistentes. Diante disso, se tornou necessária a busca por outras formas de controle que sejam mais viáveis tanto economicamente quando ecologicamente. A Inativação Fotodinâmica (IFD) baseia-se no uso de uma molécula fotossensibilizadora que é ativada pela luz em determinado comprimento de onda, originando espécies reativas de oxigênio que provocam danos celulares e destruição nos tecidos. Nesse estudo foi utilizada a curcumina, molécula proveniente de rizomas da planta *Curcuma longa* , que tem sido estudada também como fotossensibilizador no controle microbiológico e de larvas do mosquito Aedes aegypti.(2) Assim, nesse estudo, foi proposto a análise dos possíveis efeitos da ação fotodinâmica provocados pela curcumina, em condições subletais, no desenvolvimento do *Aedes aegypti* . Os primeiros testes com larvas de primeiro estágio indicaram atraso no período de desenvolvimento quando expostas à solução de curcumina, bem como alterações na proporção de machos e fêmeas. Essa é uma questão de grande importância biológica no processo de tornar viável a aplicação da curcumina como fotolarvicida no controle vetorial, e os resultados se mostraram promissores.

Referências:

1 BRASIL. Ministerio da Saude. Secretaria de Vigilância em Saúde.Monitoramento dos casos de Arboviroses urbanas transmitidas pelo Aedes (dengue, chikungunya e Zika) até a Semana Epidemiológica 5 de 2019. **Boletim Eidemiologico,** v. 50, fev. 2019. Disponível em: http://portalarquivos2.saude.gov.br/images/pdf/2019/fevereiro/26/2019-04-Dengue-SE-5-publica—-o-18-02-2019.pdf. Acesso em: 15.06.2019. 2 DE SOUZA, L.M. *et al.* Photolarvicidal effect of curcuminoids from Curcuma longa Linn. against Aedes aegypti larvae. **Journal of Asia-Pacific Entomology** , v. 22,n.1, p. 151-158, 2018.

207

PG104
Supercondutores holográficos multi-componentes

APRILE, N. ; HARTMANN, B.
nathaprile@usp.br

Desde o advento da dualidade gauge-gravity, soluções de 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 (1), para o qual - até agora - nenhuma descrição miscroscópica existe no padrão da teoria da matéria condensada.No meu trabalho estou estudando supercondutores holográficos multi-componentes(2), 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.

Referências:

1 BRIHAYE, Y.; HARTMANN, B. Holographic superconductors in 3+ 1 dimensions away from the probe limit. **Physical Review D,** v.81, n.12, p.126008, 2010. 2 LI, Zz. H.; FU, Y. C. ; NIE, Z. Y. Competing s-wave orders from Einstein–Gauss–Bonnet gravity. **Physics Letters B** , v.776,p.115-123, 2018.doi.org/10.1016/j.physletb.2017.11.031.

208

PG105

Optical thermometry based on Nd^{3+}/Yb^{3+}-doped fluorophosphate glasses

FARIA, W. ; GONÇALVES, T. S. ; CAMARGO, A. S. S.
walter.faria@usp.br

Optical temperature sensors enable fast and long-distance measurements in environments where standard contact sensors are ineffective, such as electrical power stations (strong electromagnetic fields), electronic circuits and biological cells (sub-micron scale). (1) These devices are based on temperature induced changes in optical properties of a given material. The fluorescence intensity ratio technique (FIR) makes use of the relative emission intensity variation of two thermally coupled levels of an emission center, usually a trivalent rare-earth ion (RE^{3+}). (2) Neodymium (Nd^{3+}) is commonly employed as its emissions lie in the near-infrared biological optical window and don't show much overlap. In this work, Nd^{3+}-doped and Nd^{3+}/Yb^{3+}-co-doped fluorophosphate glasses with excellent optical and spectroscopic properties (3) are employed as the temperature sensing material. Sensibilities as high as 1.96%/K are obtained through the FIR of 800 and and 870 nm Nd^{3+} emissions. The use of the emission ratio of 750 and 870 nm was also investigated and results in even higher sensibilities. The addition of ytterbium (Yb^{3+}) to the glasses makes the sensibilities increase to 2.77%. Further analysis involved the ideal glass matrix characteristics to enhance the system's performance, the phonons role in the energy transfer between the ions and the energy transfer pathways. Other RE^{3+} pairs exhibiting strongly temperature dependent energy transfer rates are indicated.

Referências:

1 BRITES, C. D. S. *et al*. Thermometry at the nanoscale. **Nanoscale** , v. 4, n. 16, 4799-4829, Aug. 2012. 2 WADE, S. A.; COLLINS, S. F.; BAXTER, G. W. Fluorescence intensity ratio technique for optical fiber point temperature sensing. **Journal of Applied Physics** , v. 94, n. 8, p. 4743-4756, Oct. 2003. 3 GONÇALVES, T. S. *et al*. Structure-property relations in new fluorophosphate glasses singly- and co-doped with Er^{3+} and Yb^{3+}. **Materials Chemistry and Physics** , v. 157, p. 45-55, May 2015. doi: 10.1016/j.matchemphys.2015.03.012.

209

PG106
Aspectos de QCD na rede a temperatura finita

LEAL JUNIOR, J. M. ; MENDES, T.
jesuel.leal@usp.br

No presente projeto são propostas simulações numéricas da Cromodinâmica Quântica na rede, com ênfase no caso da teoria em condições extremas de temperatura (1), em que se observa a transição para o chamado plasma de quarks e glúons, ou QGP. A formulação de rede da rede baseada na quantização por meio de integrais de trajetória de Feynman, na continuação para tempos imaginários ou euclidianos e na discretização do espaço-tempo contínuo em uma rede quadridimensional, fornece o meio ideal para o estudo não-perturbativo da teoria. (2) A rede introduz uma regularização ultra-violeta, já que o espaçamento de rede corresponde essencialmente a um corte para momentos altos. O limite do contínuo é recuperado tomando-se esse espaçamento tendendo a zero. Além disso, uma teoria de campo euclidiana pode ser vista como um modelo de mecânica estatística clássica (em quatro dimensões) com uma densidade de probabilidade. E possível, portanto, utilizar métodos teóricos e numéricos usuais em mecânica estatística para o estudo da QCD. Alguns dos objetivos do projeto são: a) buscar grandezas mensuráveis na rede que possam ser relacionadas a parâmetros de ordem para melhor caracterizalção da transição de fase de desconfinamento na QCD, b) investigar a relação entre essas diferentes grandezas e possivelmente compreender melhor o papel da transição quiral nos cenários de altas temperaturas e de desconfinamento. Em particular, a parte longitudinal do propagador do glúon a baixos momentos parece ser sensível a alterações na temperatura e seu comportamento próximo a temperatura crítica deve ser investigado em detalhe. (3)

Referências:

1 KANAYA, K. An introduction to finite temperature quantum chromodynamics on the lattice. **Progress of Theoretical Physics Supplement** , v. 131, p. 73-105, Feb. 1998. doi: 10.1143/PTPS.131.73. 2 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice** : an introductory presentation. Berlin: Springer, 2010. (Lecture Notes in Physics, v. 788). 3 CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Long-distance properties of Landau gluon and ghost propagators and deconfinement. **Proceedings of Science** , p. 393-1-393-3, 2016. Disponível em: https://pos.sissa.it/256/393/pdf. Acesso em: 11 jun. 2019.

210

PG107

Atividades opticas de biomoléculas na presença de nanoestruturas plasmônicas

MAREGA, E. ; MIRANDA, M. M. P.

messiasmpm@usp.br

O conhecimento dos processos celulares ao nível molecular é de extrema importância nos dias de hoje tanto para tornar diagnósticos clínicos mais precisos como no desenvolvimento de novas terapias incluindo, por exemplo, a entrega controlada de fármacos. Para entender os processos celulares, cada vez mais, o uso de ferramentas e técnicas ultrassensíveis, que possibilitam identificar uma quantidade muito pequena de biomoléculas (chegando ao limite de uma única espécie) para obtenção de informações de sua organização e dinâmica vem crescendo e se tornando uma área de pesquisa multidisciplinar.(1) Neste contexto técnicas ópticas são candidatas a ter um papel importante na identificação (diagnóstico) de biomoléculas e mesmo na ação direta no tratamento de doenças por meio da combinação de espectroscopia e imagem celular. O projeto em andamento visa introdução de técnicas ópticas tais como microscopia confocal óptica de fluorescência de dois fótons e microscopia confocal Raman, ambas com resolução celular, para estudar a organização do núcleo da célula no seu ciclo de vida, através de imagens espectrais em diferentes fases do ciclo celular.(2) As concentrações sítio específicas de DNA, por exemplo, podem ser determinadas no nucléolo, a partir de medidas de espectroscopia Raman para diferentes concentrações de ácidos nucleicos e diferentes tamanhos de segmentos do DNA e sua atividade óptica medida nas diferentes fases do ciclo. Posteriormente esses dados serão validados por de eletroforese capilar, para que no final obtenha informações concretas sobre a atividade óptica dos ácidos nucleicos e do DNA ao longo do sítio de transcrição. O que diferencia nosso trabalho do que esta sendo realizado na literatura é a conjunção destas técnicas com o incremento no sinal da atividade óptica quando estas espécies são colocadas nas proximidades de estruturas plasmônicas.(3) Como já demonstramos no trabalho realizado durante o mestrado a atividade óptica de biomoléculas, no caso específico segmentos de DNA, apresentaram sinais ópticos quatro ordens de magnitude maior quando comparado com o sinal da mesma amostra num substrato padrão.

Referências:

1 DOSTALEK, J.; KASRY, A.; KNOLL, W. Long range surface plasmons for observation of biomolecular binding events at mtallic surfaces. **Plasmonics** , v.2, n. 3, p. 97-106, 2007. 2 KWON, Y. W.; CHOI, D. H.; JIN, J. I. Optical, electro optic and optoelectronic properties of natural and chemically modified DNAs. **Polymer Journal** , v. 44, n. 19, p. 1191-1208, 2012. 3 BENNER, R. E.; DORNHAUS, R.; CHANG, R. K. Angular emission profiles of dye molecules excited by surface plasmon waves at a metal surface. **Optics Communications** , v. 30, n. 2, p.145-149, 1979.

211

PG108

Representação e caracterização de circuitos amplificadores através de grafos.

MIRANDA, W. M.
willianmulia@usp.br

Há tempos, grafos são considerados úteis para a física teórica, economia, sociologia e biologia. Porém atualmente já se tornaram uma potente ferramenta também para representar e modelar os mais diversos fenômenos nas mais diversas áreas.(1) No ramo da eletrônica, existe uma grande variedade de circuitos eletrônicos amplificadores, sendo muitos desses com funções similares ou complementares. Tendo base que circuitos eletrônicos (digitais e analógicos) podem ser representados por grafos e que também podem apresentar padrões redes complexas do tipo pequeno mundo ou "small world" quando devidamente representados (2), a pesquisa em questão busca representar e caracterizar vários circuitos amplificadores (no nível de componentes eletrônicos) através de grafos, os quais terão medidas aferidas com finalidade de identificar, posteriormente, possíveis agrupamentos quais poderão auxiliar na definição de classes distintas. Esta pesquisa também tem o objetivo de desenvolver um programa computacional que auxilie o usuário na criação dos respectivos grafos, o que será útil também para novos pesquisadores. Através desse programa, obtém-se grafos baseados nas arquiteturas dos circuitos amplificadores em questão, levando em conta o tipo, distribuição e polarização de cada componente eletrônico presente em cada circuito estudado e modelado nesta pesquisa. Por meio da utilização da biblioteca aberta iGraph, através da linguagem de programação R, é feita a visualização dos grafos e aferidas as medidas necessárias para o auxílio na identificação dos parâmetros divergentes em cada rede ou circuito. Com isso, esperamos poder entender melhor a diversidade desses circuitos eletrônicos cujos quais possuem grande utilização atualmente.

Referências:

1 COSTA, L. F. *et al.* Analysing and modeling real-world phenomena with complex networks: a survey of applications. **Advances in Physics** , v.60, n. 3, p. 329-412, 2011. 2 CANCHO, R. F.; JAANSSEN, C.; SOLÉ R. V. Topology of technology graphs: small world patterns in eletronic circuits. **Physical Review E** , v. 64. n. 4, p. 046119-1-046119-5, 2001.

212

PG109

When clock and system interact: Page-Wootters' mechanism

MENDES, L. ; SOARES-PINTO, D.
lrs.mendes@usp.br

Although everyone could agree that time passes when questioned about the nature of time, if it is only a parameter or an observable, mixed answers would be given. Some (or perhaps most) would state that time is nothing more than a parameter that appears in Schrodinger's equation and it is representative of a classical clock on the wall of a lab oratory. Others would want to elevate time to an observable and put it on an equal footing to other quantities as position and momentum in a similar way that was done in special relativity.(1) What it seems is that if time really is an observable it is an inaccessible one. One solution for the seemingly inaccessibility of time was given by Page and Wootters.(2) They argued that time could not be observed because there may exist a superselection rule (SSR) for the energy, in a similar way that there is a SSR for charge.(3) This statement leads to the question: If there is an SSR for the energy how do we agree that time passes? Page and Wootters proposed that time emerges from correlations between non-interacting subsystems in a way that part or parts of the subsystem act as clocks for the rest, and in respect to which the time flows. Here we investigate the Page-Wootters's conditional probability interpretation for time when clock and system are interacting. We introduced two types of interaction taking the form of an Ising Hamiltonian in a transverse and non-transverse field. It is seen that the interaction between clock and system do not always presents itself as disruptive, being able to improve the mechanism, specially in the regime of high interaction.

Referências:

1 PAGE, D. N.; WOOTTERS, W. K. Evolution without evolution: dynamics described by stationary observables. **Physical Review D** , v. 27, n. 12, p. 2885-2892, 1983. 2 STRELTSOV, A.; ADESSO, G.; PLENIO, M. B. Colloquium: quantum coherence as a resource. **Reviews of Modern Physics** , v. 89, n. 4, p. 041003-1-041003-34, 2017. 3 WICK, G. C.; WIGHTMAN, A. S.; WIGNER, E. P. The Intrinsic parity of elementary particles. **Physical Review** , v. 88, n.1, p.101, 1952.

213

PG110

Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos

MARTINS, T. T. ; SEGURA, C. ; SILVA, P. F. ; MUNIZ, S.
thalyta@usp.br

Desde o desenvolvimento dos métodos de controle do movimento e posição de partículas usando lasers, ainda no início da década de 1970, até o reconhecimento com o prêmio Nobel de Física de 2018, uma das principais e mais versáteis ferramentas de manipulação óptica, as chamadas pinças ópticas, tem sido usadas majoritariamente para explorar objetos em dois regimes de tamanhos: o limite das partículas sub-nanométricas (átomos e moléculas simples), e o limite das partículas micrométricas.(1) Nesse contexto, foi desenvolvido e construído um novo aparato experimental para aprisionar micro e nanopartículas numa pinça óptica. Estudos de dinâmica foram conduzidos para fins de calibração do sistema, além do desenvolvimento de modelos necessários para melhor compreender os fenômenos envolvidos. Dentre os diferenciais da pinça óptica construída está a capacidade de desenhar potenciais ópticos que podem ser controlados dinamicamente usando modulação acusto-óptica.(2) O trabalho desenvolvido até então deve prosseguir nos próximos anos com o objetivo de contribuir com o contínuo avanço da fronteira na área de aprisionamento óptico, além de explorar propriedades termodinâmicas de nano-sistemas fora do equilíbrio, bem como a capacidade de controlar nano-sensores quânticos, baseados em centros nitrogênio-vacância em nanodiamantes.

Referências:

1 ASHKIN, A. **Optical trapping and manipulation of neutral particles using lasers** : a reprint volume with commentaries. Singapore: World Scientific Publishing,2006. 2 MUNIZ, R.; RAMAN, C. Producing time-averaged arbitrary landscape potentials to manipulate becs. *In*: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ATOMIC PHYSICS, ICAP,20,2006, Innsbruck,Austria. **Proceedings [...]** Innsbruck:2006.

214

PG111
Effects of crosslinking agents on PEDOT:PSS films

SOUZA, R. F. S. ; FARIA, G. C.
rafael.francisco.sousa@usp.br

The electrical conductivity of poly(3,4-ethylenedioxidethiophene) with polystyrenesulfonate(PEDOT: PSS) depends significantly on its morphology, microstructure and number of counter ions that balance the positive doping charges carried by the conjugated PEDOT chains. However, due to the high solubility of PSS-rich domains in water or other polar solvents, PEDOT:PSS films easily undergo dissolution when exposed to such solvents. (1) In order to prevent such dissolution, crosslinking agents are normally added to the polymer solution, prior to film formation, to stabilize the solid-state film. As consequence of crosslink addition, both the film morphology and electronic/ionic conductivity are negatively impacted, generating films with lower performances when compared to crosslink-free samples. Here we aim to analyze the behavior of PEDOT:PSS films mixed with different crosslinking agents, namely the 3-glycidyloxypropyltrimethoxysilane, 3-chloropropyltrimethoxysilane, 3-methacryloxypropyltrimethoxysilane, and 3-Methacryloxypropyltrimethoxysilane. The electrical conductivity was evaluated by means of four-probe measurement, revealing that PEDOT:PSS film crosslinked with 3-Methacryloxypropyltrimethoxysilane is the one with the closest electrical conductivity to the pristine PEDOT:PSS films. Regarding the ionic conductivity, we have conducted Impedance Spectroscopy and results suggest that the traditionally used 3-glycidyloxypropyltrimethoxysilane is not among the crosslink agents with the best ionic conductivity. Our work suggest that the usage of more optimized crosslink agents can enhance the performance of PEDOT:PSS mixed ionic-electronic conductor devices.
Acknowledgements:
This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001

Referências:

1 HAKANSSON, A. *et al.* Effect of (3-glycidyloxypropyl)trimethoxysilane (GOPS) on the electrical properties of PEDOT:PSS films. **Journal of Polymer Science B** , v. 55, n. 10, p. 814-820, May 2017.

215

PG112

Naegleria spp. Diversity on Monjolinho River Basin – São Carlos, State of São Paulo

BELLINI, N. K. ; THIEMANN, O. H.
nkbellini@gmail.com

Naegleria spp. has been one of the most studied genera among the Free Living Amoeba (FLA) group due to its thermophilic characteristic and for *N. fowleri* being a pathogenic species, capable of causing human encephalitis.(1) Named Primary Amoebic Meningoencephalitis (PAM), the disease faces two main drawbacks: difficulty in diagnosis and lack of an efficient treatment (2) resulting in more than 95% fatality of infection.(3) As a free living organism it can be found in water and soil, so the knowledge of its geographical distribution is critical to better comprehend its niche and to prevent new contamination cases. Besides, by mapping *Naegleria* spp. diversity it is possible to access evolutionary patterns revealing relationships among them. Considering the lack of Brazilian studies on *Naegleria* spp. environmental distribution, this PhD research aims to characterize its diversity in the Monjolinho River Basin, São Carlos-SP. The methodology includes water collection in five sampling sites, limnological analysis to determine eutrophication along the river, culture of the isolates on non-nutrient agar (NNA) plates, thermo tolerance assay to search thermophilic pathogenic species, DNA extraction, 18S rDNA sequencing and phylogenetic tree reconstruction. Through culture on NNA plates, the amoeba growth was observed in all sampling sites. In association with sequencing results, five *Naegleria* species could be found: *N. australiensis, N. philippiniensis, N. gruberi, N. dobsoni* , and *N. canariensis* , besides *Valkampfia* . At the most eutrophic site four of the six amoebas identified in this work were present. Regarding the thermo tolerance assay, solely *N. australiensis* could withstand 44°C. In contrast with earlier literature reports, our result revealed an increase in the maximum temperature that *N. australiensis* tolerates. Although human pathogenic species did not occur in this collection, the presence of *N. australiensis* and *N. philippinensis* , both capable of causing brain infection in animal models, represent a warning to animals surrounding river. This work contributes to the understanding of the amoeba distribution in Brazil.

Referências:

1 ONG, T.Y.Y.; KHAN, N.A.; SIDDIQUI, R. Brain-eating amoebae: Predilection sites in the brain and disease outcome. **Journal Clinical Microbiology** ,v.55, n.7, p.1989-1997,2017.doi:10.1128/JCM.02300-16. 2 BELLINI, N.K;, SANTOS, T.M.; SILVA, M.T.A.; THIEMANN, O.H.The theapeutic strategies against Naegleria fowleri. **Experimental Parasitology** , v.187, p.1-11,2018. doi:10.1016/j.exppara.2018.02.010. 3 DE JONCKHEERE, J.F. Origin and evolution of the orldwide distributed pathogenic amoeboflagellate Naegleria fowleri. **Infection Genetic in Evolution** , v.11,n.7, p.1520–1528,2011. doi:10.1016/j.meegid.2011.07.023.

216

PG113

Depletion spectroscopy of ultracold x=0 85Rb2 molecules trapped in a crossed optical dipole trap

PASSAGEM, H. ; MARCASSA, L.

henry.passagem@usp.br

In this work, we have loaded x=0 85Rb2 ultracold molecules into a crossed optical dipole trap from a standard magneto optical trap using a single light beam. Such beam is composed of a single frequency coherent light source, which is responsible for short range PA of cold rubidium atoms, and an incoherent broadband light source which transfers the molecules in different vibrational levels (x) of the singlet-ground-state X, into x=0, through optical pumping. The molecules were observed, by REMPI technique, through 11 transitions from the x=0 X1+g ground state to the 21+u excited state in the 20853-20985 cm−1 energy range. (1) Due to the bandwidth of the REMPI laser we were unable to resolve the rotational distribution of the x=0. Therefore, we have performed depletion spectroscopy in the x=0 trapped molecules using a diode laser at 682 nm to drive transitions from vX=0 to v=0 of the b1u potential. The pulsed dye laser frequency was set at the largest peak at 20966.9 cm−1. The experimental depletion spectrum, which is in good agreement with theoretical predictions, allows us to determine that 75 % the x=0 molecules are in J= 0, 1 and 2 rotational states. (2)

Referências:

1 PASSAGEM, H. F. *et al*. Formation of ultracold molecules induced by a high-power single-frequency fiber laser. **Journal of Physics B** , v. 50, n. 4, p. 045202-1-045202-6, Feb. 2017. 2 PASSAGEM, H. F. *et al*. Continuous loading of ultracold ground-state 85Rb2 molecules in a dipole trap using a single light beam. **Physical Review Letters** , v. 122, n. 12, p. 123401-1-123401-6, Mar. 2019.

217

PG114
MRI applications for porous media

CARDOSO, C. ; PAIVA, F. F. ; FOERSTERA, B. U.
camilabaleiro@gmail.com

Classical Magnetic Resonance (MR) applications for material sciences and medical diagnostics have been extended to study porous media, mainly due to the applications for the oil industry. However, MR imaging in porous media is challenging due to short relaxation times and different magnetic susceptibility between rock walls and pores, which compromise the image quality. (1-2) In a previous work, we have introduced a model system developed to mimic real rocks in order to study the morphology in porous media under precisely controlled conditions. The proposed rock model was used to compare different imaging techniques and acquisition protocols, which allowed us to evaluate the applicability of conventional MR imaging techniques for porous media. Our results showed that, despite the susceptibility variations on the medium and short relaxation times, the uncertainties on the final evaluation were below the spatial resolution threshold, therefore not representing a limiting factor. This suggests that MR imaging techniques can indeed be used to study of porous media. Now our challenge is to study the behaviour of water and oil within these rocks by simulating the accuracy of low-angle multi-touch inverted angle gradient (GRE) fat quantification methods using MR spectroscopy as the reference. (3) The fat fraction (FF) will be calculated from T2-corrected fat and water spectral peak areas. Signals involving a low flip angle (to suppress the effects of T1) and multiple echo times (to estimate the effects of T2 *) will be simulated. To correct the effects of T2* a multi-sequence sequencing analysis method will be assumed. The fat percentage will be compared with the FF spectroscopic values by means of a linear regression. This will evaluate the accuracy of the fat quantification methods that will be used for oil and water analysis on rocks.

Referências:

1 GALLEGOS, D. P. A NMR technique for the analysis of pore structure: application to materials with well-defined pore structure. **Journal of Colloid and Interface Science** , v. 119, n. 1, p. 127-140, Sept. 1987. 2 HAACKE, E. M. *et al.* **Magnetic resonance imaging:** physical principles and sequence design. New York: Wiley, 1999. 3 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, Apr. 2009.

218

PG115

Síntese e caracterização de potenciais inibidores da diadenilato ciclase de S. aureus: um novo alvo molecular essencial

MENEGHELLO, R. ; NAVARRO, M. V. A. S.
raphael.meneghello@usp.br

Segundos mensageiros são moléculas sinalizadoras usadas por todos organismos para desencadear cascatas de processos moleculares a fim de se adaptarem adequadamente aos estímulos do ambiente. Especialmente em bactérias, essas moléculas são, em sua maioria, baseadas em nucleotídeos. É o caso do cAMP, cGMP, c-di-GMP, entre outros. Recentemente, o c-di-AMP (adenosina monofosfato dimérica cíclica) emergiu como um novo segundo mensageiro, e diferentemente dos outros nucleotídeos, é o único essencial, controlando diretamente processos vitais para as bactérias, principalmente em Gram-positivas.(1)Homeostase celular, escaneamento da integridade do DNA, esporulação e metabolismo energético são alguns dos processos controlados por essa nova via de sinalização. O c-di-AMP é sintetizado através da condensação de duas moléculas de ATP por proteínas que possuem o domínio DAC (DiAdenilato Ciclase). Diferentes domínios, associados ao domínio DAC, conferem a essas proteínas diferentes funções dentro de cada bactéria. Entretanto, independentemente de suas funções, o aumento ou diminuição da síntese de c-di-AMP por essas proteínas, e por conseguinte, a mudança na sua concentração intracelular, são sinais que desencadeiam processos moleculares adequados. A mais abundante das diadenilato ciclases, as CdaA, são proteínas transmembranares que não possuem nenhum domínio associado. Sua função é manter a síntese basal de c-di-AMP.(2) Ainda, as CdaA são, na maioria dos organismos, as únicas diadenilato ciclases, como é o caso em *Staphylococcus aureus* , *Lysteria monocytogenes* , importantes patógenos humanos. Bactérias que possuem mais que uma diadenilato ciclase são exceções. Dessa forma, a importância da CdaA as torna um novo alvo molecular para o desenvolvimento de novos fármacos, principalmente em bactérias como *S. aureus* , capazes de se adaptarem e adquirir facilmente mecanismos de resistência, como é o caso das *S. aureus* resistentes a meticilina (MRSA), principal causadora das infecções hospitalares. Neste trabalho, é apresentada a busca e desenvolvimento de moléculas com potenciais inibitórios frente a CdaA, a partir de dados cristalográficos e de cinética inibitória, bem como síntese de novos compostos orgânicos desenhados racionalmente.(3)

Referências:

1 ROMLING,U. Great times for small molecules: c-di-AMP, a second Messenger candidate in bacteria and Archaea. **Science Signaling** , v.1, n.33, p.e39, 2008. 2 CORRIGAN, R. M.; GRUNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology** , v.11,p.513-524,2013.doi:1.1038/nrmicro3069. 3 VILUMS, M. *et al.* Understanding of molecular substructures that contribute to hERG K+ Channel Blockade: synthesis and biological evaluation of E[U+2010]4031 analogues. **ChemMedChem** , v.7: 107-113, 2012. doi:10.1002/cmdc.201100366.

219

PG116

Desenvolvimento de filmes de Fe_2TiO_5 para a formação de eletrodos aplicados na fotossíntese artificial para geração de hidrogênio solar

CORRÊA, A. S.

andressacorrea@usp.br

A energia solar é abundante o suficiente para garantir o suprimento energético mundial, hoje proveniente principalmente dos combustíveis não-renováveis. Nesse contexto, surge a possibilidade de geração de energia por processos sustentáveis utilizando energia renovável. Dentre as metodologias disponíveis, uma das mais promissoras é a produção de hidrogênio solar por reação de fotossíntese artificial. (1) Esse processo inspirado na fotossíntese natural utiliza um semicondutor com band gap mínimo de 1.23 eV , boa condutividade de portadores de carga e baixa taxa de recombinação. (2) Então, levando-se em consideração essas características, o presente trabalho aborda o desenvolvimento de Fe_2TiO_5 como fotoanodo, devido às características promissoras deste material. (3) As estruturas dos filmes sintetizados pelo método de Pechini foram caracterizadas por difração de raios-X (DRX), Microscopia eletrônica de varredura (MEV) e espectroscopia Raman. Os resultados de DRX e Raman confirmaram a fase pseudobrookita (fase única), característica da Fe_2TiO_5, único componente do filme produzido até o momento. Além disso, as imagens de MEV mostraram homogeneidade das superfícies dos filmes e uniformidade dos tamanhos dos grãos. A capacidade de oxidação da água pelos filmes também foi analizada por PEC, e, indiretamente, a capacidade de geração de hidrogênio.

Referências:

1 SOUZA, F. L.; LEITE, E. (ed.) **Nanoenergy** : nanotechnology applied for energy production. 2nd. ed. Cham: Springer, 2018. 2 BASSI, P. S. *et al.* Crystalline Fe2O3/Fe2TiO5 heterojunction nanorods with efficient charge separation and hole injection as photoanode for solar water oxidation **NanoEnergy** , v. 22, p. 310-318, Apr. 2016. doi: 10.1016/j.nanoen.2016.02.013. 3 DENG, J. *et al.*, Thin-Layer Fe2TiO5 on hematite for efficient solar water oxidation. **ACSNano** , v. 9, n. 5, p. 5348-5356, 2015.

220

PG117

Buracos negros e soluções compactas em teorias escalar-tensoriais da gravidade

CONSOLE, F. ; HARTMANN, B.
felipe.console@usp.br

Apesar das previsões da Relatividade Geral (RG) estarem de acordo com todas as observações e experimentos já realizados pelos humanos, há motivos para acreditar que a RG não pode ser a palavra final no que diz respeito à gravidade. Entre esses motivos encontram-se as misteriosas matéria e energia escura, sobre as quais sabemos muito pouco. Na tentativa de entender o que são matéria e energia escura, por exemplo, foram propostos várias modelos de teorias de gravidade que diferem da RG, sendo estes modelos conhecidos como teorias alternativas à RG. O exemplo mais simples mas no entanto, com uma rica fenomenologia, é o modelo escalar-tensorial da gravidade. Nestes modelos, em geral, há um acoplamento não mínimo entre o campo escalar e o tensor métrico, o que faz o campo escalar desempenhar um papel não trivial no espaço tempo, modificando as equações de Einstein da RG. (1-2) Temos como objetivos neste trabalho, estudar soluções das equações de teorias escalar-tensoriais da gravidade que descrevem buracos negros ou objetos compactos, como estrelas de bosons e compará-los com as soluções da RG.

Referências:

1 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, Dec. 2014. 2 BRIHAYE, Y.; HARTMANN, B.; URRESTILLA, J. Solitons and black hole in shift symmetric scalar-tensor gravity with cosmological constant. **Journal of High Energy Physics** , v. 2018, n. 6, p. 074-1-074-14, June 2018.

221

PG118

Análise de padrões e propriedades na modelagem de redes proteína-proteína

GAMBOA, C. A. G. ; BRUNO, O. M.
agrossogamboa@gmail.com

As interações proteína-proteína (IPP) operam em quase todos os níveis de funções celulares; e a maioria das proteínas faz parte de algum tipo de complexo proteico em algum momento particular da vida de uma célula. As proteínas podem formar redes e complexos de interação em processos celulares, como replicação, transcrição e tradução do DNA; metabolismo de RNA; controle do ciclo celular; metabolismo energético; transdução de sinal; transporte de metabólitos, entre outros. (1) A construção da rede de interações proteína-proteína é essencial para o estudo das propriedades dinâmicas dos sistemas celulares. Uma rede de interação deste tipo incluiria sistemas chave, tais como vias metabólicas, cascatas de sinalização e redes de controlo de transcrição. (2) Atualmente existem muitos sistemas reais, em diversas áreas do conhecimento, e a biologia não é a exceção e apresenta um alto grau de complexidade, e o estudo das propriedades das redes, por meio de abordagens clássicas, não obteve sucesso. Existem muitos sistemas que têm um número grande de constituintes e que suas propriedades macroscópicas ou coletivas não estão, em geral, relacionadas com as propriedades de seus constituintes individuais, neste caso, estamos diante de um sistema complexo. (3) Com o advento da genômica funcional, o estudo de porque as proteínas evoluem é uma questão fundamental na evolução molecular, essa questão agora pode ser abordada em uma escala genômica ampla. Diferentes estudos de mudanças evolutivas reveladas pela análise de dados genômicos funcionais incluem dispensabilidade de proteína, nível de transcrição e número de interações proteína-proteína. Assim, fica claro que a evolução das proteínas está intimamente relacionada às redes de interação que ocorrem entre elas, portanto, é importante estudar diferentes modelos de redes proteína-proteína para aproveitar essas redes em o estudo de padrões e avaliar evidências evolutivas entre espécies e as mudanças sofridas nas redes nos processos evolutivos. Para a execução desta pesquisa será utilizado o banco de dados de BIND (*Biomolecular Interaction Network Database*), e a metodologia utilizada será a teoria de grafos, fractais e inteligência artificial. Como resultados, espera-se encontrar padrões claros que permitam encontrar evidências evolutivas entre as espécies estudadas.

Referências:

1 ALOY, P. A. G.; RUSSELL, R. B. Ten thousand interactions for the molecular biologist. **Nature Biotechnology** , v. 22, p. 1317-1321, 2004. doi: 10.1038/nbt1018. 2 TESCHENDORFF, A. E. *et al.* Increased signaling entropy in cancer requires the scale-free property of protein interaction networks. **Scientific Reports** , v. 5, p. 9646-1-9646-1, 2015. doi:10.1038/srep09646. 3 DILÃO, R. A. ciência dos sistemas complexos. **Técnica** , n. 1, p. 5-18, mar. 1995. Disponível em: http://sd.ist.utl.pt/NonLinear_Dynamics_Group/Awareness_files/complexos.pdf. Acesso em: 22 jun. 2019.

222

PG119
Férmions de Majorana e supercondutores topológicos

ARAÚJO, R. N. ; EGUES, J. C.
ronaldonasaraujo@gmail.com

Modos de Majorana tem sido preditos em modelos de matéria condensada, em especial aqueles simulados pela cadeia de Kitaev. Esses partículas são encontradas nas extremidades de cadeias unidimensionais na presença de acoplamento onda-p e são estados protegidos topologicamente. (1) Entretanto, na natureza este tipo de supercondutor é difícil acesso, inviabilizando a realização experimental. Fu and Kane sugeriram em 2010 um modelo experimental em que se acopla um supercondutor onda-s – comumente encontrado na natureza- a um fio quântico semicondutor com forte acoplamento spin-órbita e efeito Zeeman e mostraram que a cadeia de Kitaev pode ser simulada e modos de Majorana surgem nas extremidades do fio quântico. (2) Neste trabalho, propomos uma discussão aprofundada do surgimento de modos de Majorana na cadeia Kitaev, bem como a topologia deste tipo de sistema.

Referências:

1 KITAEV, A. Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. **Physics-Uspekhi** , v. 44, Suppl., p. 131-136, Oct. 2001. 2 FU, L.; KANE, C. L. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator. **Physical Review Letters** , v. 100, n. 9, p. 096407-1-096407-4, Mar. 2008.

223

PG120

Estratégias em modelagem molecular e avaliação biológica para uma série de candidatos à fármacos para a leishmaniose

TELES, H. ; ANDRICOPULO, A. D.

henrique.teles@ifsc.usp.br

A leishmaniose visceral é uma tropical negligenciada de alcance mundial que atinge milhões de pessoas. (1) Os fármacos disponíveis para o tratamento dessa doença são caracterizados por algumas limitações como a complexidade do tratamento, toxicidade e resistência. Neste contexto, o desenvolvimento de novos fármacos para a leishmaniose é uma importante demanda, particularmente em países altamente prevalentes para essa doença como o Brasil. O objetivo deste projeto de mestrado é o planejamento e a avaliação biológica de candidatos a novos fármacos para a leishmaniose visceral. Moléculas com atividade promissora contra o parasita causador da doença, o protozoário *Leishmania infantum* , identificadas em nosso laboratório, serão utilizadas no projeto. Estes compostos possuem atividade antiparasitária em ensaios fenotípicos in vitro e alguns possuem alta seletividade para o parasita em relação à células humanas hospedeiras. O projeto prevê o emprego de técnicas de planejamento de fármacos baseadas na estrutura do ligante (LBDD, na sigla em inglês para Ligand-Based Drug Design), além de ensaios fenotípicos in vitro. Os estudos em LBDD envolvem o desenvolvimento de modelos de relações quantitativas entre estrutura e atividade (QSAR, na sigla em inglês para Quantitative Structure Activity Relationships) e entre estrutura e propriedade (QSPR, na sigla em inglês para Quantitative Structure-Property Relationships). (2) Os modelos quimiométricos gerados serão utilizados na identificação de propriedades moleculares relevantes, na predição de parâmetros de atividade e de propriedades farmacocinéticas de novos compostos e na proposição de novas estruturas para síntese e avaliação biológica. O projeto será desenvolvido no Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC) do Instituto de Física de São Carlos (IFSC-USP). Este projeto está integralmente inserido no escopo do laboratório e irá contribuir para o avanço das nossas pesquisas em uma área que representa um grande problema de saúde pública no Brasil.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Leishmaniasis** . Disponível em: http://www.who.int/leishmaniasis/en. Acesso em: 10 jun. 2019. 2 BACILIERI, M.; MORO, S. Ligand-based drug design methodologies in drug discovery process: an overview. **Current Drug Discovery Technologies** , v. 3, n. 3, p. 155-165, 2006.

224

PG121

Photodynamic inactivation applying at S. aureus biofilm developed at endotracheal tube

ZANGIROLAMI, A. C. ; INADA, N. ; BAGNATO, V. ; BLANCO, K. C.
zangirolami.amanda@gmail.com

Infectious disease is a continuous treatment challenge for the hospitals. Ventilator Associated Pneumonia (VAP) is one of the most dangerous respiratory disease, because can lead the patient to death. The majority of the antibiotics can not destroy the cells from the developed biofilm at a surface of the endotracheal tube. The endotracheal tube is a tube which auxiliated the patient to breath.(1) The biofilm is a way of the bacteria to grow, formed by the cells and a matrix called extrapollimeric matrix that gives a protection to the cells against antibiotic agents, acid and temperature.(2) The photodynamic therapy is a solution for kill a biofilm of S. aureus cells using blue light, curcumin as a photosensitizer and cellular oxygen. Different formulations and different ways to delivered the photosensitizer were tested. A curcumin film, curcumin dissolved in the surfactant tween 80, a nanoskin soaked with curcumin and curcumin dissolved at dmso and alcohol were the formulation tested at S. aureus and Escherichia coli biofilm. The time of the biofilm developed (1-7 days of developed biofilm) as the concentration, incubation time of the curcumin and the dose light were tested to optimize the experiments. Different type of ilumination was tested, testing the irradiance and the time dose for kill the cells. An experimental designes were planned and the PDT was optimized.

Referências:

1 PERKINS, S. D.; WOELTJE, K. F.; ANGENENT, L. T. Endotracheal tube biofilm inoculation of oral flora and subsequent colonization of opportunistic pathogens. **International Journal Medical Microbiology** , v. 300, n.7,p. 503-511,2010. 2 LINDSAY, D.; HOLY, A. Bacterial biofilms within the clinical setting: what healthcare professionals should know. **Journal of Hospital Infection** , v.64, n.4, p. 313-325,2006.

225

PG122

Produção de nanocelulose: processo de isolamento da celulose através do pré-tratamento ácido - alcalino.

KANE, A. O.
aok358@gmail.com

A rarefação esperada das fontes fósseis e o desejo de reduzir o óxido de carbono levaram a pesquisa a recursos naturais como a biomassa. A biomassa é composta principalmente de celulose, há também a presença de lignina e hemicelulose. Com a fibra vegetal, a celulose pode ser encontrada em uma fase amorfa conectada à fase cristalina por ligações de hidrogênio intramoleculares e intermoleculares. É possível extrair nanopartículas de tamanho nanométrico chamadas nanocelulose. Nosso trabalho é baseado nessa extração.O objetivo do nosso trabalho é a produção de nanocelulose para aplicações no campo de células solares, materiais biodegradáveis, limpeza de água etc. Para isso, vamos explorar vários métodos de síntese dessas nanocelulose que são grupos em métodos químicos e mecânicos. O primeiro passo na obtenção dos nanocelulose é isolar a celulose, para isso, pré-tratamentos são usados para remover a lignina e a hemicelulose.Vamos começar com um pré-tratamento ácido-alcalino (1), este é o primeiro passo que queremos apresentar no poster. A caracterização da biomassa antes e após o pré-tratamento será feita e a hidrólise enzimática será feita para verificar a eficiência dos pré-tratamentos.Serão utilizados também métodos de caracterização como microscopia eletrônica de varredura, difração de raios X, espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier.

Referências:

1 NASCIMENTO, S. A.; REZENDE, C. A.Combined approaches to obtain cellulose nanocrystals, nano[U+FB01]brils and fermentable sugars from elephant grass. **Carbohydrate Polymers** , v.29, p.38-45, 2017.doi.org/10.1016/j.carbpol.2017.09.099.

226

PG123

Estratégias em quimioinformática para uma série de compostos antichagásicos

MEDEIROS, A. R. ; ANDRICOPULO, A. D.
alex.medeiros@usp.br

A doença de Chagas é uma doença tropical negligenciada, causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi* , que afeta aproximadamente 8 milhões de pessoas. Por conseguinte, provocando mais de 10 mil mortes por ano e 25 milhões de pessoas correm o risco de adquirir a doença. (1) A doença é endêmica em 21 países da América Latina, sendo encontrado casos na América do Norte, Europa, Ásia e Oceania. Atualmente, os quimioterápicos disponíveis, o benznidazol e o nifurtimox, possuem alta toxicidade, causando efeitos adversos severos e, além disso, apresentam baixa eficácia no tratamento da doença.(2) Dessa forma, a descoberta e o desenvolvimento de novos fármacos, seguros e eficientes, para o tratamento da doença de Chagas se torna uma necessidade de saúde pública. A cruzaína, enzima presente no *T. cruzi* , é um alvo molecular validado e explorado na busca de novos fármacos. Estudos demonstram a sua importância no ciclo de vida do protozoário, sendo essencial em diversos processos para o avanço da doença. (2) Nesse contexto, o projeto tem como objetivo a otimização dos inibidores da cruzaína, utilizando estratégias computacionais de química medicinal e planejamento de fármacos. A classe de inibidores são compostos líderes derivados benzimidazólicos. (3) O estudo consiste na modelagem molecular, por meio da aplicação de diversos métodos e técnicas na busca de novas informações sobre as interações entre os inibidores e o alvo molecular. Portanto, a cruzaína será a enzima alvo do presente trabalho, empregando a abordagem computacional viabilizando o planejamento de novos fármacos para o tratamento da doença de Chagas.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Chagas disease (*American Trypanosomiasis*)** . Disponível em: http://www.who.int/chagas/en/ Acesso em: 09 jun. 2019. 2 FERREIRA, L. G.; ANDRICOPULO, A. D. Targeting cysteine proteases in trypanosomatid disease drug discovery. **Pharmacology Therapy** , v. 180, p. 49-61, Dec. 2017. doi: 10.1016/j.pharmthera.2017.06.004. 3 FERREIRA, R. S. *et al*. Synthesis, biological evaluation, and structure-activity relationships of potent noncovalent and nonpeptidic cruzain inhibitors as anti- *Trypanosoma cruzi* agents. **Journal of Medicinal Chemistry** , v. 57, n. 6, p. 2380-2392, 2014.

227

PG124

FlowMR: um protótipo baseado no modelo a fluxo de dados, escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo

TEIXEIRA, J. ; RUGGIERO, C. A. ; MATIAS, P.

jtsjunior@gmail.com

Desde meados dos anos 60, existe uma grande discussão com relação ao ganho em desempenho computacional. Ainda nesta época, essa discussão já pairava sobre duas principais vertentes. De um lado, acreditava-se que seria possível o aumento indefinido na frequência do clock dos processadores, de forma que as operações dos programas poderiam ser executados a uma taxa de frequência mais alta e isso garantiria ganho em desempenho computacional, conforme previsto empiricamente pela Lei de Moore. O outro lado da discussão argumentava que poderia haver limitações físicas que impediriam o aumento indefinido da frequência de clock, e que para obter ganhos significativos em desempenho computacional, seria necessária a realização de operações concorrentes onde fosse possível. (1) Pudemos verificar nas últimas décadas que realmente existem limitações físicas que não permitem mais o aumento na frequência de clock, como fora no passado (1), como o princípio da incerteza, ou a dissipação da potência em calor, por exemplo. Dessa forma, a outra vertente da discussão ganhou grande notoriedade e atualmente, o ganho em desempenho computacional é obtido principalmente a partir da execução concorrente de operações. A fim de reduzir a dependência do programador em extrair as capacidades de paralelismo do processador, diversos paradigmas de computação paralelas foram exploradas ao longo deste período. Dentre estas abordagens, uma que se destaca por sua simplicidade e capacidade de exploração de paralelismo, é o paradigma da computação dirigida por dados. Neste paradigma, as instruções presentes no programa que se deseja executar são ativadas a partir da disponibilidade de todos os dados necessários para sua execução. Com isso, o paralelismo passa a se tornar intrínseco à arquitetura do processador e não mais dependente exclusivamente da estrutura do programa que se deseja computar. (2) Uma implementação desse paradigma que se destacou em sua época foi a Máquina Dataflow de Manchester (MDFM), um poderoso processador baseado no modelo dinâmico a fluxo de dados, e que foi tomado como a base de nosso estudo. Uma das principais características da MDFM é a fina granularidade de seu conjunto de instruções. Esta característica permite a exploração de uma quantidade significativa de paralelismo. (2) Entretanto, a estrutura da arquitetura necessita de uma grande quantidade de recursos para lidar com tamanho paralelismo. Dessa forma pretendemos aumentar sensivelmente a granularidade desta máquina, distribuindo as ações dos programas entre múltiplas instâncias da MDFM, no conceito conhecido como Multianel. (3) Nesta nova abordagem, cada anel que irá compôr a estrutura da máquina ficará alocada em uma placa de FPGA de baixo custo. Com isso, buscamos descentralizar a execução dos programas, a fim de evitar sobrecarga de instruções nos recursos de cada anel da estrutura. Além disso, a partir dessa nova abordagem, pretendemos aumentar a quantidade de unidades de processamento tanto quanto necessário, em um sistema paralelo.

Referências:

1 MARKOV, I. L. Limits on fundamental limits to computation. **Nature** , v. 512, p. 147-154, Aug. 2014. doi: 10.1038/nature13570. 2 GURD, J. R. The Manchester dataflow machine. **Computer Physics Communications** , v. 37, n. 1-3, p. 49-62, July 1985. 3 BARAHONA, P. M. C. C.; GURD, J. R. Processor allocation in a multi-ring dataflow machine. **Journal of Parallel and Distributed**

228

Computing , v. 3, n. 3, p. 305-327, Sept. 1986.

229

PG125

Decontamination of circulating fluid with ultra-violet applied in foods

OLIVEIRA, B. P. ; BLANCO, K. ; BAGNATO, V. S.

b.p.oliveira@ifsc.usp.br

The microbiological control in the food industry is an important aspect to promote food safety and quality. In this regard, chemical solutions (30- 80 ppm) of hydroxide of sodium, hiperacetic, hypochlorite has been utilized . (1) The international organization of food safety request that reduction of chemical substances applied due to environmental problems. Because of this, the present research has shown a possible to apply an alternative technique of the circulating fluid to leaching the food and decontaminations of water applying UV light.(2) Results show a convergent photo-reactor utilized with closed-loop process of washing broccoli, consequently the decontamination water of carrying. This work describes a possibility of reducing microorganism present in the vegetable and decontamination of water circulation also, a kinetics describe has shown the disinfection decrease during the time.(3) The process created no hazardous waste fluid or an application any chemical solution for obtaining this results.

Referências:

1 FRAUNHOFER INSTITUTE FOR PRODUCTION TECHNOLOGY. **Industry 4.0 - connected, adaptive production.** .2016.Disponivel em:http://www.ipt.fraunhofer.de/en/trends/industry40.html Acesso em: 04 set. 2018. 2 GAYAN, E.; CONDON, S.; ÁLVAREZ, I. Biological aspects in food preservation by ultraviole light: a review. **Food and Bioprocess Technology** , v.7, n.1, p.1-20, 2014. 3BARBOSA-CANOVAS, G. V. *et al.* Kinetics of microbial inactivation for alternative food processing technologies - Ultraviolet leght. **Journal of Food Science** , v.65, n.8, 2000.

230

PG126

Aplicações de Ressonância Magnética Nuclear ao estudo de rochas reservatório utilizando polarização nuclear dinâmica

SÁ, A. A. C. ; BONAGAMBA, T. ; MONTRAZZI, E.
alessandro.sa@ifsc.usp.br

O estudo de rochas reservatório é fundamental para a optimização dos métodos e estratégias de produção da indústria de petróleo, a qual sempre procura reduzir seus custos e aumentar a vida útil de seus reservatórios. Nestes estudos, duas questões básicas são investigadas: a quantidade de óleo e gás presentes nas rochas e a dificuldade para sua extração. Para isto, são fundamentais as informações sobre o tamanho e distribuição dos poros de amostras de rocha, além da composição de suas paredes e dos coeficientes de difusão de fluidos das mesmas. A partir de técnicas baseadas na observação das taxas de decaimento dos sinais de RMN devido à relaxação transversal (T2), à longitudinal (T1) ou à descoerência induzida por difusão (1), as técnicas de RMN têm ajudando a obter estas informações quase que desde o início de seu estabelecimento como meio de investigação das interações entre sólidos e fluidos.(2) As principais limitações destas 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. Para superar essas limitações, o objetivo deste trabalho é a utilização de técnicas de Polarização Nuclear Dinâmica (PND) para ampliação do sinal de RMN proveniente de amostras de rochas reservatório. A PND (3) consiste na 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 B0, de um pulso de radiofrequência na faixa de UHF em uma amostra de rocha saturada com uma solução aquosa 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 potências, buscando obter a máxima ampliação possível dos sinais provenientes das amostras, para posterior combinação desta técnica com aquelas de relaxometria e difusometria por RMN.

Referências:

1 KIMMICH, R. **NMR tomography, diffusometry, relaxometry** : a personal retrospective of the last four decades. New York: Springr Science Business Media, 2012. 2 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D. J.; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance** : petrophysical and logging applications. Oxford: Elsevier, 2002. (Handbook of geophysical exploration: seismic exploration, v. 32). 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.

231

PG127

Transporte coerente de luz em amostras atômicas ordenadas e desordenadas

FERNANDEZ, M. F.
mfrometa93@gmail.com

O espalhamento de luz pela matéria diluída pode ser tratado como um fenômeno de difusão de ondas. A interferência construtiva de caminhos de espalhamento múltiplo gera desvios do comportamento puramente difusivo, que se acentuam à medida em que o livre caminho médio é reduzido. Abaixo de um certo valor crítico do livre caminho médio, modelos escalares de difusão de ondas em sistemas desordenados predizem a emergência da localização de Anderson, ou a supressão da difusão, já verificado para ondas acústicas e de matéria, e para a luz somente na difusão 1D e 2D. (1-2) Recentemente a existência da localização 3D de ondas vetoriais, como a luz, foi teoricamente questionada (3), e hoje é aceito que ela não deveria acontecer na ausência de um forte campo magnético, por conta da presença de termos de curto alcance no campo elétrico próximo da luz que se tornam fortes quando a densidade de espalhadores aumenta,abrindo canais de polarização pelos quais a luz pode ainda difundir. Este trabalho propôe o estudo do espalhamento de luz 3D no regime denso por uma assembleia de átomos frios isotrópicos, com o objetivo de identificar experimentalmente assinaturas da ausência da localização e da interação interatômica efetiva de curto alcance. A medida da modificação da dependência universal da sub e superradiância com a profundidade ótica da amostra, da emergência de correlações estatísticas na luz espalhada, da saturação da profundidade ótica para estas amostras densas são os principais desafios experimentais específicos deste trabalho.

Referências:

1 JENDRZEJEWSKI, F. *et al.* Three-dimensional localization of ultracold atoms in an optical disordered potential. **Nature Physics** , v. 8, n. 5, p. 398-403, May 2012. 2 LAHINI, Y. *et al.* Anderson localization and nonlinearity in one-dimensional disordered photonic lattices. **Physical Review Letters** , v. 100, n. 1, p. 013906-1-013906-4, Jan. 2008. 3 SKIPETROV, S. E.; SOKOLOV, I. M. Absence of Anderson localization of light in a random ensemble of point scatterers. **Physical Review Letters** , v. 112. n. 2, p. 023905-1-023905-5. Jan. 2014.

232

PG128
Aspectos da QCD na rede à temperatura finita

CERQUEIRA, M. ; MENDES, T.
matheus.c.cerqueira@gmail.com

A cromodinâmica quântica (QCD) é a teoria de gauge que descreve as interações fortes através de um modelo de quarks, no qual estes interagem por troca dos campos dos glúons. Uma característica importante desta teoria é que ela apresenta comportamentos distintos quando se está em um regime de altas e baixas energias. Em especial, no limite de baixas energias, é observado que os quarks e glúons estão confinados em partículas chamadas de hádrons, através dos estados ligados dos quarks. Uma das maneiras de estudar este comportamento é através de métodos não perturbativos, no qual utilizamos o da QCD na rede. Este método é um dos mais bem estabelecidos para se trabalhar com QCD em baixas energias, tornando-se uma ferramenta indispensável para melhor compreensão destes fenômenos e suas quantidades mensuráveis. Este trabalho utiliza de simulações numéricas com métodos de Monte Carlo para estudar os modelos de QCD na rede em SU(2) e SU(3), tendo como objetivo a análise da transição de fase confinante dos quarks a temperatura finita, utilizando o parâmetro de ordem da teoria (loop de Polyakov). (1-2) Este trabalho está utilizando apenas a implementação de um regime de puro gauge (ausência de quarks), estudando mais especificamente o propagador dos glúons em redes simétricas (Temperatura zero) (3) e assimétricas (temperatura finita), para melhor compreensão no futuro do comportamento do propagador ao redor da temperatura crítica de transição tanto em SU(2) quanto em SU(3).

Referências:

1 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice** : an introductory presentation. Berlin: Springer, 2010. (Lecture notes in physics, v. 788). 2 ROTHE, H. J. **Lattice Gauge theories** : an introduction. 4th ed. Singapore: World Scientific, 2012. (World scientific lecture notes in physics, v. 82). 3 CUCCHIERI, A. Gribov copies in the minimal Landau gauge: the influence on gluon and ghost propagators, **Nuclear Physic B** , v. 508, n. 1-2, p. 353-370, Dec. 1997.

233

PG129

Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas

LUCHESI, A. C. ; BRUNO, O.

ana.luchesi@usp.br

O mapa logístico (1) consiste em uma relação de recorrência proposta pelo físico Robert May como um modelo simples para descrever um crescimento populacional.(1)

$$x_n = x_{n-1}R(1 - x_{n-1}) \tag{1}$$

Esse sistema determinístico apresenta sensibilidade às condições iniciais para certos valores do parâmetro R, o que o leva a um comportamento caótico após um certo número de iterações. Devido à sua simplicidade, o mapa logístico é uma das equações mais estudadas quando se trata de sistemas complexos e teoria do caos. Uma das consequências do comportamento de sistemas caóticos é que sua previsão a longo prazo se torna impossível. No entanto, o surgimento de redes neurais recorrentes do tipo Echo State possibilitou prever o futuro de séries temporais caóticas com acurácia 2400 vezes superior a outros métodos (2), além de obter, com pequeno erro, o futuro do sistema de Kuramoto-Sivashinsky por até oito tempos de Lyapunov.(3) Nas últimas décadas, o aprendizado de máquinas com redes neurais artificiais tem se mostrado uma das mais poderosas ferramentas para a resolução dos mais diversos problemas, como detecção de objetos em imagens e tradução de textos. As redes neurais recorrentes possuem a propriedade de manter memória de entradas anteriores e, por conseguinte, são as mais indicadas quando sequências e séries temporais estão sendo analisadas. Nesse contexto, nosso objetivo é, além de estudar os métodos para prever o futuro do mapa logístico, investigar como essas previsões podem se relacionar com propriedades desse sistema.

Referências:

1 MAY, R. M. Simple mathematical models with very complicated dynamics. **Nature** ,v. 261:459-467,1976. 2 JAEGER, H.; HAAS, H. 2004.Harnessing nonlinearity: predicting chaotic systems and saving energy in wireless mmunication. **Science** , v.304,p.78-79,2004. 3 PATHAK, J. *et al.* Model-free prediction of large spatiotemporally chaotic systems from data: a reservoir computing approach. **Physical Review Letters** , v.120, n.2, p.024102,2018.

234

PG130

Estudos estruturais de glicosiltransferases envolvidas na síntese de biofilmes em Enterococcus faecalis

CLEMENTINO, L. O. D.
livia.clementino@usp.br

A habilidade de ser resistente a antibióticos por parte de bactérias não é algo recente (1), geneticamente, vários mecanismos que conferem resistência bacteriana a antibióticos produzidos atualmente também eram verificados em cepas de épocas passadas. Entretanto, bactérias com resistência a antimicrobianos estão sendo selecionadas rapidamente pelo uso excessivo e irregular de antibióticos. Torna-se então importante estudar vias e outros fatores que conferem resistência bacteriana. Neste trabalho, o foco de estudo é determinar a estrutura e função específica de duas glicosiltransferases (GT) de *E. faecalis* , epaI e epaOX, participantes do cluster gênico epa (enterococcal polysaccharide antigen), um conjunto de genes que expressam proteínas responsáveis pela síntese e exportação de polissacarídeos que ficam ancorados no peptidoglicano da bactéria. Os genes epaI e epaOX codificam proteínas as quais estão envolvidas na síntese de biofilmes. (2-3) Biofilmes atuam como proteção natural para as bactérias que por eles são envolvidas, facilitam a transferência horizontal de genes, favorecendo a aquisição de resistência bacteriana à antibióticos. O gene da enzima epaI foi amplificado a partir de uma biblioteca de gDNA de *E. faecalis* , enquanto o gene da enzima epaOX foi sintetizado com códons otimizados para a expressão em *E. coli* . Os genes foram clonados em vetor pET-Trx1A. Cepas de expressão Rosetta (DE3), Artic, C43, pLEMO21 e pLysS foram usadas em testes de expressão das enzimas como tentativa de otimização da solubilidade dessas glicosiltransferases, assim como a expressão de formas truncadas das sequências proteicas. Por enquanto não foi possível observar melhora da solubilidade das GTs quando expressas nas cepas testadas. O truncamento epaI 130 foi o mais promissor, porém, ele ainda carrega outro problema encontrado com as GTs, a não exposição da cauda de histidina, o que dificulta a cromatografia por afinidade em resina de níquel, e, consequentemente, o rendimento da proteína. O uso de detergentes como CHAPS e Triton x-100 foi aplicado para auxiliar na solubilização das proteínas, o que recupera fração considerável da proteína, entretanto, como ainda não é possível verificar se as proteínas se mantêm nativas através de testes enzimáticos pela falta de conhecimento sobre as reações específica que elas catalisam, outras soluções estão sendo consideradas para resolver esse problema.

Referências:

1 PAWLOWSKI, A. C. *et al.* A diverse intrinsic antibiotic resistome from a cave bacterium. **Nature Comunications** , v. 7, n. 13803-1-13803-10. Dec. 2016. doi: 10.1038/ncomms13803. 2 DALE, J. L. *et al.* Restructuring of *Enterococcus faecalis* biofilm architecture in response to antibiotic-induced stress. **Biofilms and Microbiomes** , v. 3, p. 15-1-15-9, 2017. doi: 10.1038/s41522-017-0023-4. 3 DALE, J. L. *et al.* Multiple roles for *Enterococcus faecalis* glycosyltransferases in biofilm-associated antibiotic resistance, cell envelope integrity, and conjugative transfer. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy** , v. 59, n. 7, p. 4094-4105. July 2015.

235

PG131

Investigation of superfluid properties in quantum degenerate mixture of sodium and potassium: gray molasses implementation

SALCEDO, E. G. I. ; MAZO, P. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; FARIAS, K. M. ; TAVARES, P. E. S. ; SCARPIN, J. A. ; AUGUSTO NETO, G. ; CASTILHO, P. C. M. ; OLIVEIRA, G. A.

edwardiraita@usp.br

The objective of our global project is to produce a Bose-Einstein Condensate (BEC) of two bosonic species (Sodium 23 and Potassium 41-39) with the possibility to vary the interspecies interaction for the study of the superfluids aspects in different regimes. (1) Through the use of techniques as Stirring Beam and Feshbach Resonances will be possible the study the nucleation of vortices in a two species BEC with tunable interactions, exploring the different miscibility regimes between Na and K, as well as formation and studies in Quantum Turbulence. But to reach all that, we need to implement different techniques of cooling and increase the atomic density for both species. In this work we show the application of the technique known as the gray molasses (2-3), with the purpose of increasing the density in phase space of an atomic cloud of potassium 41. Various parameters were scanned as detuning's Raman as well as time of pulses and intensity of the beams. We report that from a MOT with 3.7E6 atoms to approximately 9 mK we get a temperature of approximately 25 uK. With this result, we have a cold sample sufficient to join with a second atomic species such as sodium in order to produce a mixture of atomic superfluids. Finally, we will implement the gray molasses technique in the sodium in order to have the two atoms with the same temperature, improving and optimizing the evaporative cooling processes.

Referências:

1 PEÑAFIEL, E. E. P. **Production of a Bose-Einstein condensate of sodium atoms and investigation considering non-linear atom-photon interaction** . 2016. 175 p. Thesis (Doctor in Science) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016. 2 SHAHRIAR, M. S. *et al.* Continuous polarization-gradient precooling-assisted velocity-selective coherent population trapping. **Physical Review A** , v. 48, n. 6, p. R4035-R4038, Dec. 1993. 3 WEIDEMÜLLER, M. *et al.* A novel scheme for efficient cooling below the photon recoil limit. **Europhysics Letters** , v. 27, n. 2, p. 109-114, 1994.

236

PG132

FlowMT — Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores many-core

FERREIRA, F. ; TRAVIESO, G. ; RUGGIERO, C. A.
felipe2.ferreira@usp.br

A mudança conceitual no desenvolvimento dos processadores que permitiu a construção de processadores *multi-core* faz necessária a construção de novos modelos de execução para permitir a extração de toda a capacidade de processamento presente nestes novos processadores, já que no modelo tradicional o usuário deve realizar de maneira eficiente as tarefas de dividir a execução entre os múltiplos núcleos e sincronizar os acessos à memória para manter a coerência dos dados.(1) Modelos de execução que utilizam os conceitos de fluxo de dados são boas alternativas para esta tarefa — estes conceitos permitem que o paralelismo disponível nos códigos seja extraído de maneira mais eficiente.(2) πFlowMT é um modelo de execução *multithreaded* dirigido pelos dados que tem como principal objetivo garantir a eficiência na extração da capacidade de processamento, não só dos processadores x86 atuais *multi-core* como também dos futuros processadores *many-core* . O modelo é implementado na forma de uma biblioteca escrita em c++, nele o fluxo de dados ocorre com granularidade grossa e é feito através de uma estrutura de dados desenvolvida chamada *codelet* . Cada instância desta estrutura possuí três elementos: um conjunto de entradas, um conjunto de saídas e uma função que opera sobre o conjunto de entradas — o fluxo de dados ocorre quando as saídas de um *codelet* começam a atuar como entradas para outros *codelets* . A análise do modelo é feita de maneira comparativa, através da implementação e execução de uma série de algoritmos distintos no modelo desenvolvido e em modelos de estado da arte — OpenMP, Intel Threading Building Blocks e OmpSs. Os algoritmos são executados em dois ambientes de execução diferentes: um simulador e um processador real, os dois ambientes se complementam, diluindo os efeitos e limitações de ambos os casos.(3) A execução dos algoritmos foi positiva, onde os resultados, na comparação com os outros modelos de execução, foram equivalentes, sendo superiores em alguns casos, principalmente no regime *many-core* .

Referências:

1 MCKENNEY, P. E.(ed.) **Is parallel programming hard, and, if so, what can you do about it ?** 2017. Disponivel em:http://neilrieck.net/misc/pdf/computer-docs/parallel-programming-hard.pdf.Acesso em: 28.06.19. 2 ARANDI, S. ; PARASKEVAS, E. Programming multi-core architectures using Data-flow techniques.In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON EMBEDDED COMPUTER SYSTEM: ARCHITECTURES, MODELING AND SIMULATION,2010, Samos,Greece. **Proceedings [...]** Samos: 2010. doi:10.1109/ICSAMOS.2010.5642072 · 3 TREVOR, E. *at al.* An evaluation of high-level mechanistic Core models. **ACM Transactions on Architecture and Code Optimization,** v.11,n.3, p.127-151,2014.

237

PG133

Complex networks computational modeling of visual attention

FERREIRA, S. ; COSTA, L.
silviojvf@hotmail.com

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 the 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.

Referências:

1 BORJI, A.; ITTI, L. State-of-the-art in visual attention modeling. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence** , v. 35, n. 1, p. 185-207, Jan. 2013. 2 COSTA, L. F. *et al.* Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics** , v. 56, n. 1, p. 167-242, Feb. 2007.

238

PG134

Avaliação dos efeitos estruturais e funcionais de diferentes inibidores da glutaminase C

TANIMOTO, C. ; AMBROSIO, A. L. B.
camila.tanimoto.rodrigues@usp.br

Devido a proliferação celular descontrolada, células tumorais apresentam maior demanda energética e biossintética. Uma adaptação metabólica característica dessas células é a preferência pela via glicolítica, mesmo na presença de oxigênio.(1) Essas adaptações acarretam no aumento de consumo de glutamina, convertida em glutamato pela enzima glutaminase para ser posteriormente metabolizado e alimentar a síntese de aminoácidos e lipídeos. Três diferentes tipos de glutaminases foram identificadas em mamíferos, sendo a glutaminase C (GAC) apontada como fundamental e tendo sido identificada em abundância em diferentes tipos de células tumorais.(2) Dessa forma, a GAC se mostra como uma forte candidata a alvo molecular em tratamentos terapêuticos de tumores. Neste contexto, o objetivo deste projeto é a avaliação do efeito de diferentes inibidores na atividade enzimática da GAC. Assim, pretende-se obter os parâmetros cinéticos através de ensaios de atividade da enzima na presença das moléculas candidatas e realizar estudos estruturais da GAC com estes inibidores. A partir da otimização dos ensaios de cristalização, pretende-se obter monocristais da proteína a fim de submetê-la futuramente a uma triagem de fragmentos (Fragment-based screening - XChem). Até o presente momento, foi realizada a expressão em larga escala através de sistema bacteriano e purificação da GAC através de diferentes cromatografias (afinidade, troca iônica e exclusão molecular) a fim de se obter um alto grau de pureza. Ensaios de atividade da proteína sem e com a presença do ativador fosfato inorgânico foram realizados, com o objetivo de verificar a atividade da proteína purificada e curvas de dose-resposta do inibidor padrão BPTES foram obtidos. A partir de diversas triagens com diferentes kits comerciais de cristalização, foram obtidos monocristais da proteína incubada com glutamato, com e sem a presença do inibidor BPTES, em diferentes condições, a serem submetidos à difração de raios-X.

Referências:

1 FERREIRA, A. P. S. **Entendendo o mecanismo de ativação e as diferenças cinéticas das enzimas kidney-type glutaminase e glutaminase C** . 2013.109p. Dissertação (Mestra em Ciências) - Instituto de Biologia, Universidade Estadual de Campinas, 2013. 2 CASSAGO, A. *et al.* Mitochondrial localization and structure-based phosphate activation mechanism of Glutaminase C with implications for cancer metabolism. **Proceedings of the National Academy of Science,** v.109,n.4,p.1092-97,2012.doi:10.1073/pnas.11124.95109.

239

PG135
Estudo de simetria em Hamiltonianos k.p

OLIVEIRA, C. E.
caio.physics017@gmail.com

Uma das mais importantes áreas da física do estado sólido é o estudo de redes cristalinas. Define-se cristais como estruturas nas quais o ordenamento atômico é descrito através de um arranjo periódico, os elétrons no interior do material podem ser descritos por meio do teorema de Bloch. (1) Entretanto, por se tratar de um problema de muitos corpos, resolver o problema de um material de muitos elétrons submetidos a um potencial periódico torna-se inviável, exigindo o uso de algumas aproximações como, por exemplo, considerar a independência dos elétrons e a própria periodicidade da rede. Usando esta última, podemos o construir o Hamiltoniano de modo a carregar a informação do vetor de onda de Bloch em separado do momento do elétron. Tal método é conhecido por método k.p.(1) O problema pode ser ainda simplificado ao levar-se em consideração a geometria do sistema. Para isso faz-se uso da teoria de grupos, que nada mais é do que o estudo da simetria.(2-3) É importante dizer que uma das mais mais importantes aplicações de teoria de grupos em física está na investigação de estruturas cristalinas conforme demonstrado por Hans Bethe em 1929. O trabalho tem como objetivo estudar cristais por meio do modelo k.p (3), a fim de verificar a natureza da interação de bandas com determinadas simetrias por meio da análise dos blocos de interação do Hamiltoniano. Para tal finalidade escolhemos duas estruturas cristalinas bem conhecidas na física de estado sólido, Wurtzita e Zincblend, com o objetivo de realizar uma profunda análise de suas propriedades quando considerando o formalismo de grupo duplo.(3)

Referências:

1 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, D. **Solid state physics** . New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976. 2 INUI, T.; TANABE, T.; ONODERA, Y. **Group theory and its applications in physics** . Berlin: Springer-Verlag, 1990. (Springer Series in Solid-State Sciences, v. 78). 3 DRESSELHAUS, M. S. ; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. **Group theory** : application to the physics of condensed matter. Berlin: Springer-Verlag, 2008

240

PG136

Study of the interaction dynamics of three different types of curcumin in planktonic cultures of three different bacterias

PINTO, F. F. J. ; GUIMARÃES, F. E. G.
fabiojr@ifsc.usp.br

Photodynamic Therapy, PDT, basically consists of the application of a photosensitizing compound, PS, and a light source with a specific wavelength, which irradiates the cells containing the PS and activates it and cause certain reactions to occur origin to singlet oxygen. Being this oxygen a highly cytotoxic form occurs its apoptosis. In view of this, it is justified the detailed and deep study of the dynamics, the interaction and the internalization of the PS induced by light. Used to combat microorganisms and called Photodynamic Inactivation, PI, the use of PS agents has become an increasingly robust and prominent alternative due to the appearance of superbugs by the uncontrolled use of antibiotics. (1-2) In this way, this present study sought to understand the interaction of three different curcumin as PS agents in three different planktonic cultures of bacteria, one gram-negative, *Escherichia coli* , and two other gram-positive strains, *Staphylococcus aureus* and *Streptococcus mutans* . Different types of absorbance measurements between the curcumin, the bacteria in order to characterize them and then all possible interactions between the three curcumin and the three bacteria. The results of curcumin characterization showed a great stability over time of curcumin with the greater presence of curcuminoids. (3) In the characterization of bacteria, in growth curves over time have shown an efficient interaction of curcumin with both gram- positive as well as gram negative. In addition, we conclude that the interactions between these curcumin and bacteria occur differently for E. coli than for S. aureus and S. mutans. In addition, it was also observed a greater interaction between the two curcumin studied with curcuminóides than only pure curcumin.

Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Terapia fotodinâmica dermatológica** : programa TFD Brasil. São Carlos: Compacta, 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. R61-R109, 2008. 3 PRATAVIEIRA, S. *et al*. Effectiveness of partially soluble photosensitizer in photodynamic microbiological inactivation: a curcumin example. In: EUROPEAN CONFERENCE ON BIOMEDICAL OPTICS, 8., 2017, Munich. **Proceedings[...]** Bellingham: International Society for Optical Engineering, 2017. v. 10417, p. 104170R-1-104170R-3.

241

PG137

Using neural networks to forecast stock prices on simulated data

SOUZA, H. R. ; MAIA, L.
humberto.souza@usp.br

This project is focused on using famous neural networks architectures in the forecast of stock prices, but the main twist of this idea is in the creation of a purely generated dataset, aimed in investigating it's effectiveness when applied in real stock prices of assets located in BOVESPA. To generate this simulated data, I simulated coupled stochastic processes that are commonly used in this field (1), that follows this type of differential equation:

$$dx = \mu dt + \sigma dW_1 d\sigma = \alpha(x, \sigma)dt + \beta(x, \sigma)dW_2 \tag{2}$$

Where x is the return and σ is the volatility of an asset (which is also considered as a stochastic variable in this model). My goal is to create a dataset large enough, using those equations, to make those neural network architectures "learn"how to forecast the stock prices in short-term predictions. In the creation of the neural network, I am focused in using famous architectures that tackles time-series purposes, such as recurrent neural networks, such as the Long short-term memory (LSTM), which are hugely used in problems where past inputs have direct effect on the current input of the system. I am also interested in developing a transforming network, which is a recent network that became famous because of it's generation of long outputs that seems to understand the patterns of it's input. This network already showed amazing performance in generating very comprehensible texts (2) and songs. (3) After the development of a well structured network that can predict stock prices with a decent precision, I will aim in using this model on real market data to improve it's performance. To fulfill this goal, I will search for **transfer learning** techniques that are commonly used to improve a neural network that were trained to work in other tasks.

Referências:

1 HESTON, S. L. A closed-form solution for options with stochastic volatility with applications to bond and currency options. **Review of Financial Studies** , v. 6, n. 2, p. 327-343, 1993. 2 RADFORD, A. *et al.* (2019). **Language models are unsupervised multitask learners.** Available from: https://d4mucfpksywv.cloudfront.net/better-language-models/language_models_are_unsupervised_multitask_learners.pdf. Acessible at: 25 July 2019. 3 PAYNE, C. MuseNet. **OpenAI** , 25 Apr. 2019. Available from: https://openai.com/blog/musenet. Acessible at: 25 July 2019.

242

PG138

Clonagem e caracterização de enzimas identificadas no secretoma do fungo termofílico Thielavia terrestris

MULINARI, E. J. ; MUNIZ, J. R. C. ; SEGATO, F.
evandro.mulinari@usp.br

Devido ao potencial de degradação e alta temperatura de atividade das enzimas secretadas pelo fungo filamentoso *Thielavia terrestris* (1) foi conduzida uma análise diferencial das enzimas identificadas por espectrometria de massas do secretoma obtido pelo cultivo do fungo em diferentes fontes de carbono. Através dele uma série de alvos enzimáticos foram selecionados para caracterização. Foram escolhidos dois sistemas de expressão heteróloga: fungo filamentoso *Aspergillus nidulans* A773 e *Escherichia coli* Rosetta Gami DE3, que visaram a obtenção em grande escala das enzimas recombinantes. As enzimas escolhidas foram lacase, arabinofuranosidades das famílias 62, 54 e 43, celulases da família 7 e xilanases da família 10. As temperaturas ótimas das enzimas foram superiores a 50 ºC, o que demonstra a característica termofílica das enzimas secretadas pelo fungo e pHs ótimos ficaram na região ácida. Uma enzima da família 7 mostrou uma estabilidade térmica bastante significativa, permanecendo com 80% da atividade após 1 hora de incubação acima de 80 ºC. Uma arabinofuranosidase da família 62 foi caracterizada, cristalizada e teve sua estrutura depositada no PDB (6CC7) (2) e uma da família 54 tbm foi cristalizada e está em fase de aquisição de dados de difração de raios X para determinação da estrutura terciária. A caracterização estrutural e a bioquímica permitem correlacionar atividade e estrutura, tornando possível otimizações da atividade e estabilidade dessas enzimas, permitindo melhorias para futuras aplicações biotecnológicas. Estudos com enzimas oxidativas para utilização em descontaminação de água por corantes, dentre elas a lacase e uma versátil peroxidase de *Myceliophthora thermophila* , foram iniciadas, mas não apresentaram potencial redox suficiente para oxidação dos corantes *Orange II* , *Phenol Red* e *Reactive Black* . Futuros ensaios para avaliar a oxidação de estrogênios e outros compostos tóxicos como BPA devem ser empregados para avaliar o potencial biotecnológico dessas enzimas.

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. 10, p. 922-927, Oct. 2011. 2 CAMARGO, S. **Caracterização funcional e estrutural da primeira arabinofuranosidase da família 62 de *Thielavia terrestres* dimerizada através de *domain swapping* .** 2018. 106 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

243

PG139

Biologia estrutural e busca por ligantes para a proteína NS5 do vírus da Zika

OLIVEIRA, K. I. Z. ; MESQUITA, N. C. M. R. ; ZUNIGA, G. A. L. ; GODOY, A. S. ; DIAS, M. V. B. ; OLIVA, G.

ketzagato@ifsc.usp.br

O vírus da Zika (ZIKV) teve a primeira ocorrência relatada no Brasil em abril de 2015. Ao infectar humanos, causa sintomas como febre moderada, erupções cutâneas, artralgias, dor de cabeça e conjuntivite, semelhantes, porém menos intensos, aos sintomas causados pelo vírus da dengue. Mais de 240.000 casos de Febre Zika (FZ) foram notificados no país de 2015 a 2019. O maior impacto da FZ ocorreu devido a sua associação com o aumento na prevalência de microcefalia em bebês e fetos de gestantes infectados com o vírus durante a epidemia que ocorreu no Brasil em 2015. Diante desses fatos, muitos estudos encontram-se em andamento para a busca de candidatos a fármacos e vacinas eficazes contra o vírus da Zika. O ZIKV é membro da família Flaviviridae, pertencente ao gênero flavivírus. A partícula viral é constituída por uma fita positiva de RNA, que codifica uma única poliproteína, a qual após processada origina 10 proteínas, sendo 3 estruturais (capsídeo, envelope e proteína de membrana) e 7 não estruturais (NSs – NS1, NS2A, NS2B, NS3, NS4A, NS4B, NS5). Dentre as proteínas não estruturais, a NS5, desperta grande potencial como alvo farmacológico. A proteína NS5 do ZIKV, possui dois domínios que desempenham funções essenciais para a replicação do RNA viral na célula infectada. O domínio RNA polimerase dependente de RNA (RdRp) que atua polimerizando fitas de RNA para construção de novas partículas virais, enquanto o domínio Metiltransferase (Mtase) está envolvido na metilação do terminal 5'cap do RNA genômico. O bloqueio específico de qualquer destas funções é letal para a replicação do vírus. Nesse contexto, os objetivos do presente trabalho são a expressão, purificação e determinação da estrutura tridimensional por cristalografia de raios X da proteína NS5 do ZIKV domínio RdRp, seguida da busca e otimização de inibidores desse domínio proteico. Até o presente momento foi possível expressar, purificar três construções do domínio RdRp, cristalizar e elucidar a estrutura cristalográfica da NS5 RdRp de ZIKV. (1) Ensaios biofísicos e cristalográficos estão sendo utilizados para a busca de ligantes. Foram obtidos alguns hits promissores que se ligam ao domínio RdRp da NS5 de ZIKV, desde pequenos fragmentos moleculares à compostos drug-like. A otimização dessas moléculas e validação de sua capacidade de influenciar a atividade polimerase do domínio RdRp na replicação viral serão avaliadas nas etapas subsequentes deste trabalho.

Referências:

1 GODOY, A. S. *et al.* Crystal structure of Zika virus NS5 RNA-dependent RNA polymerase. **Nature Communications** , v. 8, p. 14764-1-14764-6, 2017. doi: 10.1038/ncomms14764.

PG140
Distribuições angulares no decaimento tau a K pi neutrino

NEVES, G. A. ; BOITO, D.
abo.gneves@gmail.com

Os decaimentos do lépton τ constituem um importante laboratório para estudo preciso de diversos aspectos da física de partículas, tanto no contexto do Modelo Padrão (SM) como em suas várias extensões Além do Modelo Padrão (BSM). (1) Por se tratar do lépton mais pesado, o τ é o único lépton que pode decair em hádrons. Como, nesses decaimentos, as complicações devido às interações fortes aparecem somente no estado final, estudos de QCD e física hadrônica podem ser feitos de maneira muito mais rigorosa do que aqueles que utilizam decaimentos de mésons pesados como o D ou B. Em particular, o acoplamento forte, α_S, pode ser extraído com precisão competitiva dos decaimentos inclusivos $\tau \to (\mathrm{hdrons}) + \nu_\tau$. Canais de decaimento com produção de quarks também permitem a determinação rigorosa do elemento de matriz V_{us} da matriz de Cabibbo-Kobayashi-Maskawa. (2) Mais recentemente, os decaimentos do τ passaram a ser considerados também no contexto de teorias BSM motivadas pelos resultados do LHC. No presente trabalho, estudaremos distribuições angulares no decaimento $\tau \to K\pi\nu$. Neste canal, as colaborações Belle e BaBar mediram uma violação da simetria de CP que difere daquela esperada no modelo padrão em 2.8σ. (3) Nosso objetivo é desenvolver observáveis angulares - como assimetrias - que possam ser úteis para se extrair o fator de forma escalar $K\pi$ bem como estudar possíveis fontes de violação de CP neste decaimento.

Referências:

1 PICH, A. Precision tau physics. **Progress in Particle and Nuclear Physics** , v. 75, p. 41-85, Mar. 2014. doi: 10.1016/j.ppnp.2013.11.002. 2 BOYLE, P. *et al.* |Vus| determination using inclusive strange decay and lattice HVP. **EPJ Web Conferences** , v. 175, p. 13011-1-13011-8, 2018. doi: 10.1051/epjconf/201817513011. 3 LEES, J. P. *et al.* Search for CP violation in the decay $- \to -$K0s($\geq$O0) **Physical Review D** , v. 85, n. 3, p. 031102-1-031102-8, Feb. 2012.

245

PG141

Tomografia de estado quântico via Ressonância Magnética Nuclear de núcleos quadrupolares isolados

ESTRADA,, R. R. A. ; BONAGAMBA,, T. T. J. ; LEAL, A. C. S. ; OLIVEIRA, E. E. L. ; FERREIRA, A. G. A.

adrianeleal@ifsc.usp.br

A técnica de tomografia de estado quântico é uma ferramenta importante nos estudos de Computação e Informação Quântica, de modo que possibilita descrever o operador densidade completo associado ao estado do sistema. Dentro deste contexto, a primeira proposta de tomografia de estado quântico via Ressonância Magnética Nuclear foi apresentada por Chuang *et al.* (1) e posteriormente aprimorada por Long *et al.* (2). Nestes dois trabalhos, os autores propuseram uma técnica de tomografia para sistemas heteronucleares de spin 1/2 acoplados. No âmbito dessa discussão, neste trabalho estudou-se a tomografia de um sistema mais complexo, com número quântico de spin I=3/2, o qual é denominado de núcleo quadrupolar, numa amostra de dodecil sulfato de sódio (DSS). Nosso interesse na tomografia para esse tipo de sistema, e de outros núcleos quadrupolares é que nos possibilita simular por exemplo estados coerentes de spin, spin squeezing e até fazer uma analogia com sistemas de partículas idênticas, inclusive no regime de simulações quânticas de sistemas de condensados de Bose-Einstein. O procedimento de tomografia estudado foi proposto por J. Teles. *et al.* (3), onde realiza-se uma série de transformações (operações de rotação do sistema de spins), de modo que existe uma seleção de coerências através do procedimento conhecido como ciclagem de fase dos pulsos de radiofrequência. Por meio dessa seleção é possível construir a matriz densidade, a qual é escrita na base de tensores irredutíveis. Como comprovação da técnica tomografou-se experimentalmente a matriz densidade de equilíbrio rotacionada por um pulso de 90 graus, como resultado obteve-se uma fidelidade maior que 95%.

Referências:

1 CHUANG, L. I. *et al.* Bulk quantum computation with nuclear magnetic resonance: theory and experiment. **Proceedings of the Royal Society of London A** , v. 454, n. 1969, p. 447-467, 1998. 2 LONG, G. L.; YAN, H. Y.; SUN, Y. Analysis of density matrix reconstruction in NMR quantum computing. **Journal of Optics B** , v. 3, n. 6, p. 376-381, 2001. 3 TELES, J. *et al.* Quantum information processing by nuclear magnetic resonance on quadrupolar nuclei. **Philosophical Transactions of the Royal Society A** , v. 370, n. 1976, p. 4770- 4793, 2012.

246

PG142

Estudo sobre assimetria mútua e o mecanismo da Page-Wootters

CARMO, R. S. ; PINTO, D. O. S.
rafael.carmo@gmail.com

Nos anos 80, os físicos Don Page e William Wootters propuseram que o tempo poderia ser um parâmetro inacessível, de forma que a aparente passagem do mesmo que experienciamos seria um fator emergente da correlação entre subsistemas de um mesmo estado global que englobaria todo o universo. Tal proposta ficou conhecida na literatura como mecanismo de Page-Wootters. Recentemente, uma subárea da teoria de informação quântica, conhecida como referenciais quânticos, tem permitido revisitar esse mesmo problema do tempo sob uma perspectiva mais moderna. Dentro dessa linha, Mendes e Soares-Pinto (1) propuseram que uma condição necessária (mas não suficiente) para tal mecanismo funcionar seriam as chamadas "coerências internas"entre o sistema de interesse e o chamado sistema relógio, diferentemente de outros artigos que defendiam ser emaranhamento a condição necessária. Para quantificar o quão bem um subsistema serve como referencial para outro, Mendes desenvolveu uma medida informacional que permite quantificar esse tipo de coerência. Numa perspectiva mais ampla, Martinelli e Soares-Pinto (2) abordaram o mecanismo de Page-Wootters sob a ótica da teoria de assimetria quântica que associa a assimetria de um estado com a sua capacidade de atuar como um referencial para outro, dada a ausência de um referencial clássico. Definindo uma medida chamada de assimetria mútua e identificando-a com a de coerência interna, tendo como foco o grupo de translações temporais, Martinelli e Soares-Pinto (2) abriram espaço para investigar o mecanismo de Page-Wootters sob uma abordagem mais matemática que faz uso de ferramentas da teoria de representação de grupos. Seguindo essa mesma linha mais matemática, nossa proposta foi analisar a estrutura das matrizes densidade de estados bipartidos que possuem coerência interna, com o intuito de compreender melhor o que são esses tipos de coerência e se o emaranhamento tem ainda algum papel nesse conceito. Como resultado, identificamos que a coerência interna pode ser escrita em termos de "estados internos"pertencentes aos subespaços invariantes do espaço de Hilbert do sistema bipartido com relação a ação do grupo U(1). Esses "estados internos", mesmo quando mistos, sempre possuirão emaranhamento ainda que o estado bipartido em si seja separável. Isso nos permite não somente resgatar a ideia do emaranhamento como recurso para o mecanismo de Page-Wootters, como também trás uma nova forma de se interpretar alguns interessantes exemplos de sistemas dados por Martinelli e Soares-Pinto. (2)

Referências:

1 MENDES, L. R. S.; SOARES-PINTO, D. O. **Time as a consequence of internal coherence** . Disponível em: https://arxiv.org/pdf/1806.09669.pdf. Acesso em: 5 jun. 2019. 2. MARTINELLI, T.; SOARES-PINTO, D. O. Quantifying quantum reference frames in composed systems: local, global, and mutual asymmetries. **Physical Review A** , v. 99, n. 4, p. 042124-1-042124-10, Apr. 2019.

247

PG143

Caracterização bioquímica e biofísica de uma esterase de Bacillus licheniformis

POLIKARPOV, I. ; LEITE, A. E. T.
anatognoli@hotmail.com

As lipases e esterases bacterianas são enzimas altamente versáteis, que estão sendo usadas em detergentes, biossurfactantes, bioemulsificantes e como biocatalisadores nas indústrias de papel e alimentos. Essas enzimas começaram a ser estudadas após a descoberta do microbiologista C. Eijkmann de que bactérias eram capazes de produzirem e secretarem esse tipo de proteína. Essas enzimas são capazes de realizar a hidrólise de triacilgliceróis além de apresentarem atividade em diferentes solventes orgânicos. (1-3) Neste trabalho foram realizadas a expressão heteróloga e purificação de uma esterase de Bacillus licheniformis assim como a sua caracterização bioquímica, biofísica e possível aplicação como bioemulsificante. A expressão foi realizada em meio LB e a purificação realizada por meio de técnicas cromatográficas de afinidade e gel filtração. Através da caracterização bioquímica foi determinada a temperatura ótima de 50°C e o pH ideal 7,0. Dentre os substratos sintéticos testados, a enzima mostrou melhor atividade em pNP-Butirato. Através da técnica de ThermoFluor e foi possível detectar uma maior estabilidade na presença de NaCl fornecendo base para estudos dessas enzimas no processo de "oil recovery". Nos testes de índice de emulsificação E24, realizado em dois diferentes substratos (óleo de girassol e azeite de oliva), foi observado que para óleo de girassol, essa enzima não apresentou boa taxa de emulsificação, já para o azeite de oliva ela atingiu a emulsificação mínima necessária para ser utilizada como bioemulsificante (50%) a partir de 100 ppm atingindo uma taxa máxima de 95% de emulsificação a uma concentração de 500 ppm. Estão sendo realizados testes de cristalização até o momento sem sucesso na otimização deles. Através desses resultados poderemos entender melhor as características dessa enzima e descobrir a partir disso possível aplicação em indústrias ou áreas biotecnológicas, como por exemplo, em processos de "oil recovery" e em produção de biodiesel por reação de transesterificação.

Referências:

1 JAEGER, K.-E.; EGGERT, T. Lipases for biotechnology. **Current Opinion in Biotechnology** , v. 13, n. 4, p. 390-397, Aug. 2002. 2 NTHANGENI, M. B. *et al*. Over-expression and properties of a purified recombinant Bacillus licheniformis lipase: a comparative report on Bacillus lipases. **Enzyme and Microbial Technology** , v. 28, n. 7-8, p. 705-712, May 2001. 3 SHARMA, R. *et al*. Purification and characterisation of a thermostable alkaline lipase from a new thermophilic Bacillus sp. RSJ-1. **Process Biochemistry** , v. 37, n. 10, p. 1075-1084, May 2002.

248

PG144

Circulação de massa em BECs espinoriais no regime de grandes comprimentos de onda

DONATO, M. H. F. ; MUNIZ, S.
mario.donato@usp.br

O estudo de Condensados de Bose-Einstein espinoriais ganharam grande destaque de pesquisa nos últimos anos devido serem plataforma de estudo de propriedades topológicas da matéria. Pelo fato de serem espinoriais — ou seja, possuírem parâmetro de ordem com 2f+1 componentes (em que f é o spin total do bóson) —, a textura de fase que apresentam são não-triviais e geram implicações físicas profundas sobre os diferentes estados em que o sistema pode estar. O trabalho que será apresentado tem por objetivo revisar as propriedades da circulação da velocidade de massa no regime de grandes comprimentos de onda, abordado na literatura (1), além de destacar as semelhanças que existem entre a descrição desses sistemas e o processo de quebra espontânea de simetria (da maneira vista em Teoria de Campos de altas energias). Uma forma de estudar esse tipo de comportamento de fase, a campo magnético nulo, no regime de grandes comprimentos de onda (em todos os pontos, o parâmetro de ordem pertence à mesma fase da matéria; ex.: fase ferromagnética) é estudar a parte espinorial do parâmetro de ordem, ζ, em que $\zeta^\dagger\zeta = 1$ e $\zeta = U(\alpha, \beta, \gamma)\zeta_0$. Os ângulos de Euler ($\alpha$,$\beta$,$\gamma$) são funções da posição e do tempo caracterizam totalmente a magnetização em cada ponto do espaço. Como é possível mostrar que a parte espinorial gera um potencial quadrivetor análogo ao do campo eletromagnético e, por sua vez, os ângulos de Euler podem descrever tal potencial, aparece na definição de velocidade de massa uma dependência direta de tais ângulos. Da definição dos ângulos de Euler, aparecem condições para suas circulações (quantização), e será mostrado que a circulação da velocidade de massa somada de uma grandeza proporcional a fase de Berry para a magnetização (uma grandeza de caráter topológico) devem ser quantizadas. (1) Será destacado que o processo para se encontrar a fase ferromagnética do condensado é análogo à quebra espontânea de simetria geralmente tratado em teorias de campo de altas energias (degenerescência do "vácuo").

Referências:

1 KAWAGUCHI, Y.; UEDA, M. Spinor Bose-Einstein condensates. **Physics Reports** , v. 520, n. 5, p. 253-381, 2012.

249

PG145
Emulador para o espectrômetro digital do CIERMag

SOUZA, P. V. B. D. ; TANNÚS, A. ; MARTINS, M. J. ; VIDOTO, E. L. G.
pedrovbdsouza@gmail.com

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 (1-2) 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. Atualmente, o Emulador contém a interface UDP para ser possível realizar a comunicação com o usuário. O Carregador também está implementado, de modo que, por meio de comandos enviados utilizando a interface UDP, o Emulador pode, por exemplo, ler e escrever dados nas memórias dos demais processadores, iniciar ou parar a execução em todos os processadores. No momento está em desenvolvimento o conjunto de instruções juntamente com a classe genérica que dará origem a todos os processadores.

Referências:

1 TANNÚS, A. *et al.* **Subsistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados de espectrômetro digital de RM: ToRM console** . BR PI 512015001485-4, 07 dez. 2015. . Registro de software. 2 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.

250

PG146

Learning Analytics e metodologias ativas como ferramenta de apoio à modernização e análise em cursos de Física e Engenharia

MARTINS, R. D. S. ; MUNIZ, S. ; ONO, B. A.
robson.martins@usp.br

Neste trabalho, iremos apresentar de que forma o uso de plataformas de gerenciamento de aprendizagem online, como o sistema e-Disciplinas (sistema de apoio às disciplinas de graduação e pós-graduação da USP), pode tornar-se uma ferramenta valiosa durante o planejamento, diagnóstico e melhoria das disciplinas de graduação, especialmente nas disciplinas de formação básica de cursos na área de Ciências Exatas (ciências, engenharia, computação e matemática).Serão apresentadas algumas análises de um grande volume de dados que têm sido coletados ao longo dos últimos três anos nas disciplinas introdutórias de Física (Física 1 e 2), que são oferecidas de forma integrada para praticamente todos os cursos do campus de São Carlos. Esses dados, que envolvem milhares de alunos, nos permitem analisar e entender alguns dos comportamentos gerais dos estudantes, durante todo o semestre, e como estes comportamentos podem e influenciam os resultados finais obtido nestas disciplinas. Os dados revelam também correlações relevantes no diagnóstico de eficácia de ações pedagógicas recentemente adotadas pelo Instituto de Física de São Carlos, envolvendo novas tecnologias educacionais e metodologias ativas de aprendizagem, e ajudam balizar escolhas bem informadas e baseadas em evidências, visando a modernização e melhoria das disciplinas de graduação oferecidas pela universidade. Estas ações, assim como afirma Berbel(1),acabam mostrando que o professor tem ganho uma maior relevância e adquirido maiores responsabilidades quando trabalha neste modelo de ensino-aprendizagem, em comparação com o ensino tradicional, desta forma, estas análises e ferramentas auxiliam e potencializam estes métodos de ensino. Estas análises possibilitam também, que o professor possa intervir de maneira mais reativa e significativa no processo de aprendizagem do aluno.

Referências:

1 BERBEL, N. A. N. As metodologias ativas e a promoção da autonomia de estudantes. **Semina** : Ciências Sociais e Humanas, v. 32, n.1, p. 25-40, 2011.

251

PG147

Caracterização estrutural das enzimas da via de biossíntese da vitamina B6 em Staphylococcus aureus

BARRA, A. L. C. ; NASCIMENTO, A. S.
angelica.barra@usp.br

Segundo a Organização Mundial de Saúde, as doenças infecciosas são a terceira causa de morte no mundo e número de casos de infecções por microrganismos multi-resistentes é crescente. *Staphylococcus aureus* , é uma bactéria gram-positiva que está entre os principais patógenos causadores de infecções no mundo, os chamados ESKAPE. No Brasil e em outros países da América do Sul mais de 50% dos casos de infecção por *S. aureus* são devidos a cepas resistentes à meticilina (MRSA). (1) Esses dados evidenciam a alarmante necessidade de se identificar novos alvos moleculares para o planejamento de novos candidatos a antibióticos. Com o avanço do sequenciamento completo de genomas, foi possível descobrir proteínas e vias metabólicas conservadas em microrganismos mas ausente em humanos, o que os torna alvos ideais para o desenvolvimento de novos antimicrobianos. (2) Dentre estas está a via de síntese *de novo* da vitamina B6 (piridoxal fosfato), que atua como cofator para diversas enzimas do metabolismo de carboidratos e aminoácidos de procariotos e eucariotos. A síntese é realizada por duas enzimas (Pdx1 e Pdx2) que atuam em conjunto, formando um complexo multimérico. A enzima Pdx2 atua como uma glutaminase e transfere uma molécula de amônia para Pdx1 que juntamente com a ribose 5-fosfato e o gliceraldeído 3-fosfato sintetiza o piridoxal fosfato. (3) O complexo enzimático de alguns patógenos já foi caracterizado, como de *Bacillus subtilis* (PDB: 2NV2), mas de *S. aureus* não. Deste modo, o objetivo desse trabalho é caracterizar estruturalmente o complexo SaPdx1/SaPdx2 assim como as enzimas isoladas de *S. aureus* . Para isso, as proteínas foram expressas separadamente em *E. coli* Rosetta (DE3) e purificadas por cromatografia de afinidade a níquel. Em seguida, as proteínas recombinantes foram clivadas com a protease *Tobacco Etch Virus* (TEV) para a remoção da *tag* e submetidas a uma cromatografia de exclusão molecular. Foi realizada uma triagem de condições de cristalização com as proteínas purificadas utilizando kits de soluções comerciais. Os ensaios foram realizados com o auxílio de um robô de cristalização, pelo método de difusão de vapor em gota sentada em placa de 96 poços. Ambas as proteínas foram bem expressas e purificadas mas, por enquanto, foi realizada a triagem de cristalização apenas de SaPdx1. Cresceram cristais em várias condições do kit Morpheus® e dados de difração foram coletados na linha MX2 do Laboratório Brasileiro de Luz Síncroton (LNLS, Campinas). Para resolução da estrutura de SaPdx1 foi utilizado o método de substituição molecular por meio dos pacotes XDS e CCP4. O refinamento da estrutura está em andamento assim como as triagens de cristalização de SaPdx2. Após a resolução das estruturas será possível iniciar os ensaios de docagem molecular para identificação de ligantes e posteriormente possíveis inibidores destas enzimas.

Referências:

1 LEE, A. S. *et al.* Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* . **Nature Reviews Disease Primers** , v. 4, p. 18033-1-18033-23, May 2018. doi: 10.1038/nrdp.2018.33. 2 DREBES, J. *et al.* MRSA infections: from classical treatment to suicide drugs. **Current Medicinal Chemistry** , v. 21, n. 15, p. 1809-1819, 2014. 3 MÜLLER, I. B. *et al.* The assembly of the plasmodial PLP synthase complex follows a defined course. **PLoS ONE** , v. 3, n. 3, p. e1815-1-e1815-9, 2008.

252

PG148

Estudo da via de biossíntese da vitamina B1 de bactérias como alvo para desenvolvimento de novos antibióticos

GUTIERREZ, R. F. ; WRENGER, C. ; NASCIMENTO, A. S.

raissa.gutierrez@usp.br

A Organização Mundial de Saúde (OMS) considera a resistência bacteriana como uma das maiores ameaças à saúde mundial e alerta para a importância de políticas públicas e esforços para a descoberta de novos antibióticos que sejam capazes de combater as bactérias resistentes aos fármacos disponíveis no mercado. (1) A tiamina (vitamina B1) é cofator essencial para a manutenção da vida de todos os organismos. (2) O objetivo do nosso trabalho é estudar a via de biossíntese da tiamina, que é ausente em humanos, mas presente em bactérias. As proteínas que integram essa via podem ser exploradas como alvos moleculares para o desenvolvimento de novos antibióticos com menor prejuízo ao hospedeiro humano. (2) O estudo foi iniciado com a clonagem de genes de microorganismos patogênicos importantes como *Staphyloccocus aureus* e *Enterococcus faecalis* em vetor de expressão pET-TRX-LIC/1a e testes de expressão, solubilidade e purificação das proteínas foram realizados. A proteína TenA de *E. faecalis* (EfTenA) rendeu mais resultados até agora. Estudos biofísicos de estabilidade térmica utilizando dicroísmo circular e fluorimetria diferencial (DSF) mostraram que EfTenA é bastante estável em tampão Tris e fosfato de sódio apresentando temperatura de "melting" de 41 e 44 °C, respectivamente. De acordo com os resultados da cromatografia de exclusão molecular e gel nativo, o ensaio de ultracentrifugação analítica corrobora a massa molecular de um dímero em solução de aproximadamente 50 kDa. Ensaios de cristalização também foram realizados e cristais de proteína cresceram em apenas uma condição do kit de cristalização Morpheus (Molecular Dimensions). Os cristais foram submetidos à difração de raio-X no Laboratório Nacional de Luz Síncroton (LNLS - Campinas) e a estrutura foi resolvida por substituição molecular utilizando os programas colaborativos do pacote CCP4 e Phenix e encontra-se em refinamento. A enzima TenA é bifuncional e pode degradar a tiamina em 4-amino-5-hidroxi metil-2-metil pirimidina (HMP) e 5-(2-hidroxi etil) -4-metil tiazol (THZ) ou pode desaminar a aminopirimidina para suprir a via biossintética com HMP. (3) Portanto, TenA é uma enzima essencial para o metabolismo da vitamina B1 e a busca pela sua validação como possível alvo molecular para o desenvolvimento de novos antibióticos é de extrema importância para os esforços de combate a bactérias multirresistentes.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Antimicrobial resistance** . 15 Feb. 2018. Disponível em: http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs194/en/. Acesso em: 10 jul. 2019. 2 MÜLLER, I. B. *et al*. The vitamin B1 metabolism of *Staphylococcus aureus* is controlled at enzymatic and transcriptional levels. **PLoS ONE** , v. 4, n. 11, p. e7656-1-e7656-9, Nov. 2009. 3 BEGUM, A. *et al*. *Staphylococcus aureus* thiaminase II: oligomerization warrants proteolytic protection against serine proteases. **Acta Crystallographica D** , v. 69, part 12, p. 2320-2329, Dec. 2013.

PG149

Perfil energético do movimento de abertura e fechamento da lisozima do vírus T4 por dinâmica molecular

SOUSA, S. C. ; NASCIMENTO, A. S.
stheffany.colmanetti@usp.br

A realização de estudos teóricos em sistemas moleculares não é trivial e requer uma grande quantidade de recursos computacionais para amostrar variações nas propriedades dinâmicas e estruturais das macromoléculas. Com o intuito de otimizar as simulações computacionais e poder amostrar eventos biológicos relevantes, foram desenvolvidas técnicas de amostragem ampliadas, permitindo a amostragem de alterações conformacionais de baixa frequência de macromoléculas em tempo computacional viável. A Dinâmica Molecular acelerada por Gaussiana (GaMD) (1) e a Dinâmica Molecular Adaptativamente Enviesada (ABMD) (2) são técnicas de amostragem ampliadas recentes e bem documentadas que provaram ser eficientes. O objetivo deste trabalho foi fazer uma comparação entre estas duas técnicas. Para isso, usamos o Lisozima T4 como um modelo, que é conhecido pelo seu movimento de ajuste induzido e que está bem documentado em relação a mudança conformacional que apresenta. (3) Três sistemas foram modelados, um contendo a enzima T4 no estado nativo (tipo selvagem), o outro com uma mutação (M6I) conhecido por resultar em uma conformação aberta entre os dois domínios da enzima e um sistema com a mutações (C54T, C97A,L99A) que permite a formação do sítio artificial na Lisozima e tendo como ligante um benzeno. Para o sistema nativo, foram simulados 10 em Dinâmica Molecular. Nas simulações do GaMD, obtivemos uma força média potencial mais grosseira (PMF), definindo dois mínimos locais, correspondentes aos estados conformacionais abertos e fechados, para o sistema tipo selvagem. Para o sistema M6I, vemos uma superfície de energia com um mínimo amplo correspondente à conformação aberta. Para o sistema ligado obtivemos um mínimo amplo correspondendo a conformação fechada. Nas simulações ABMD, os resultados são semelhantes aos apresentados pelo GaMD, no entanto, já vemos um perfil de energia mais preciso em relação às simulações do GaMD. O sistema nativo foi analisado através do pyEMMA e obtvemos valores de tempo para a transição entre estados próximo de valores descritos experimentalmente pela literatura. Em conclusão, embora ambos os métodos possam definir superfícies de energia similares, na ABMD,devido ao potencial enviesado, maior convergência e cálculos mais precisos foram alcançados ao custo da escolha a priori de uma variável coletiva.

Referências:

1 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, Aug. 2015. 2 MORADI, M. *et al.* The adaptively biased molecular dynamics method revisited: new capabilities and an application. **Journal of Physics** : conference series, v. 640, n. 1, p. 012020-1-012020-12, 2015. 3 YIRDAW, R. B.; MCHAOURAB, H. S. Direct observation of T4 lysozyme hinge-bending motion by fluorescence correlation spectroscopy. **Biophysical Journal** , v. 103, n. 7, p. 1525-1536, Oct. 2012.

254

PG150

Expressão e purificação de mono oxigenase lítica de polissacarídeo

HIGASI, P. ; ARNOLDI, V. ; POLIKARPOV, I.
paulahigasi@ifsc.usp.br

A utilização efetiva da biomassa vegetal depende da quebra das ligações que unem seus componentes, e da liberação das subunidades dos carboidratos que compõem a biomassa. Enzimas que atuam em carboidratos são divididas em diversos tipos e famílias no banco de dados Cazy (*carbohydrate active enzymes*), que incluem hidrolases de glicosídeos (GHs, como celulases), e enzimas de atividade auxiliar (AA). Entre as AAs encontram-se as mono oxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs). LPMOs ganharam destaque nos últimos dez anos por sua capacidade de aumentar a conversão de polissacarídeos recalcitrantes. (1) Desde então, descobriu-se que LPMOs dependem de um doador de elétrons, e que possuem seu sítio catalítico na superfície, e no centro deste, um íon cobre, que catalisa a hidroxilação da ligação glicosídica, no carbono C1 e/ou C4 da hexaose, resultando em uma lise na cadeia polissacarídica. Sequencias de genes que codificam para LPMOs são encontradas em fungos, bactérias, plantas, invertebrados e vírus, e até o momento, estão distribuídas em sete famílias no Cazy. Apesar do grande progresso alcançado nos últimos anos, ainda resta muito a ser descoberto sobre essas enzimas. (2) Neste trabalho, uma LPMO originária do fungo *Thermothelomyces thermophilus* foi produzida de forma heteróloga em *Aspergillus nidulans* , e purificada até homogeneidade aparente. Esta LPMO pertence à família AA9, apresenta bimodularidade, com um domínio catalítico e um de ligação a carboidratos. Apresenta alta temperatura de desenovelamento, podendo chegar a 75 ºC em determinados tampões. É capaz de atuar em substrato celulósico e análise dos produtos de reação indicam que hidroxila tanto no carbono C1 quanto no C4, resultado em ácidos aldônicos e cetonas. Retém atividade mesmo após incubação em temperaturas superiores a de enovelamento, o que possibilita a eliminação de possíveis contaminações resultantes da expressão em organismo hospedeiro que também possui conjunto de enzimas celulolíticas. Suas características tornam esta enzima de interesse na sua aplicação em conjunto com outras na degradação da biomassa.

Referências:

1 VAAJE-KOLSTAD, G. *et al.* An oxidative enzyme boosting the enzymatic conversion of recalcitrant polysaccharides. **Science** , v. 330, n. 6001, p. 219-222, Oct. 2010. 2 EIJSINK, V. G. H. *et al.* On the functional characterization of lytic polysaccharide monooxygenases (LPMOs). **Biotechnology for Biofuels** , v. 12, p. 58-1-58-16, 2019. doi: 10.1186/s13068-019-1392-0.

255

PG151
Representações geométricas de grafos com aplicações.

RESENDE, B. M. F. ; COSTA, L. F.
messias.physics@gmail.com

Em um recente trabalho mostramos como podemos caracterizar grafos direcionados usando a dinâmica de uma partícula quântica sujeita a ação de um campo magnético. Tal dinâmica pode ser usada para revelar características de redes sociais ou ser usada como medida de comparação entre redes distintas. (1) Em contra-partida podemos mapear sistemas físicos para grafos e estudar as representações geométricas de tais estruturas objetivando revelar transições de fase topológicas e não-topológicas.

Referências:

1 MESSIAS, B.; COSTA, L. F. **Characterization and space embedding of directed graphs and social networks through magnetic Laplacians** . 2018. Disponível em: https://arxiv.org/pdf/1812.02160.pdf. Acesso em: 10 jun. 2019.

256

PG152
Condensados com vórtices armadilhados no bubble trap

TOMISHIYO, G. ; CARACANHAS, M.
tomishiyo@gmail.com

Condensados de Bose-Einstein (BEC) em potenciais do tipo *bubble trap* são sistemas propícios para investigar o regime de altas rotações, com velocidades angulares comparáveis à frequência de aprisionamento da armadilha. Para o caso de um potencial harmônico simples espera-se que a física do sistema seja mapeável para a física de uma única partícula sob ação de um campo magnético uniforme; como a rotação do sistema efetivamente diminui o potencial de aprisionamento, esta situação não pode ser explorada com liberdade por experimentos no caso harmônico. Neste trabalho, desenvolveremos a teoria para condensados em potenciais do tipo *bubble trap* com e sem a presença de gravidade, lançando mão principalmente de técnicas variacionais, fundamentadas em ansatz para funções do tipo menor nível de Landau e outras técnicas já exploradas para o caso de potenciais quárticos. (1-3) Também investigaremos numericamente a transição de condensados ocupando volumes esféricos para cascas.

Referências:

1 AFTALION, A.; BLANC, X.; DALIBARD, J. Vortex patterns in a fast rotating Bose-Einstein condensate. **Physical Review A** , v. 71, n. 2, p. 023611-1-023611-11, Feb. 2005. 2 DANAILA, I. Three-dimensional vortex structure of a fast rotating Bose-Einstein condensate with harmonic-plus-quartic confinement. **Physical Review A** , v. 72, n. 1, p. 013605-1-013605-6, July 2005. 3 FU, H.; ZAREMBA, E. Transition to the giant vortex state in a harmonic-plus quartic trap. **Physical Review A** , v. 73, n. 1, p. 013614-1-013614-14, Jan. 2006.

257

PG153
Strain em semicondutores III-V politípicos

SIQUEIRA, A. ; SIPAHI, G.
anderson.siqueira@usp.br

A partir do início da década de 2010, com o incremento dos métodos de crescimento por epitaxia da fase vapor, ou VPE (da sigla em inglês *Vapor Phase Epitaxy*), aprimoraram-se as técnicas de crescimento de fios quânticos, ou nanofios. Em nanofios, em função da possibilidade de relaxamento da tensão lateral, existe a possibilidade de crescimento de materiais em fases metaestáveis, como a fase wurtzita para sistemas III-V, que tradicionalmente cristalizam na fase blenda de zinco. Na verdade, a variação de parâmetros de crescimento permite mudar a fase de crescimento do material a gosto do crescedor.Os modelos simplificados que incluem propriedades ópticas, como em Gadret *et al.* (1) não incluem detalhamento da banda de valência. Apesar deste modelo de luminescência e da existência de trabalhos anteriores que descrevem a relação entre grupos de simetria de cristais das duas regiões distintas (2), não havia um modelo que descrevesse as duas fases ao mesmo tempo, inviabilizando uma abordagem mais realística. No artigo anterior do grupo (3) foi desenvolvido um modelo, usando a base menos simétrica, a wurtzita, e as relações entre as representações das duas fases para descrever a fase zinc-blende com a função de suprimir a simetria entre [0001] e as direções [100] e [010] e definir como nulo o termo do potencial cristalino nesta mesma fase. Um tratamento semelhante foi feito para a descrição do *strain* . As mesmas características que permitem o crescimento de fios politípicos permitem a realização de sistemas que do ponto de vista eletrônico se comportam como bulk crescidos na fase wurtzita. Para isto basta que o fio tenha largura suficiente para que na direção perpendicular ao crescimento, a largura de coerência dos portadores seja consideravelmente menor que a largura do fio. Como os sistemas são mais facilmente crescidos com centenas de nanômetros, esta condição é facilemente atingida. O estudo proposto aqui pode ser entendido como uma continuação deste trabalho. Nele propomos o cálculo de estrutura eletrônica de sistemas crescidos na fase wurtzita ou politípicos. Este estudo se dará com o uso da teoria de massa efetiva e de programas computacionais desenvolvidos no laboratório de Física Computacional do IFSC.

Referências:

1 GADRET, E. G. *et al.* Valence-band splitting energies in wurtzite InP nanowires: photoluminescence spectroscopy and ab initio calculations. **Physical Review B** , v. 82, n. 12, p. 125327-1-125327-12, Sept. 2010. 2 MURAYAMA, M.; NAKAYAMA, T. Chemical trend of band offsets at wurtzite/zinc-blende heterocrystalline semiconductor interfaces. **Physical Review B** , v. 49, n. 7, p. 4710-4724, Feb. 1994. 3 FARIA JUNIOR, P. E.; SIPAHI, G. M. Band structure calculations of InP wurtzite/zinc-blende quantum wells. **Journal of Applied Physics** , v. 112, n. 10, p. 103716-1-103716-10, Nov. 2012.

258

PG154
Controle da não Markovianidade pela dissipação de um qbit

LIMA, R. B. B. ; BRITO, F. B. ; PINTO, D. O. S. ; AZEVEDO, E. R. ; FILGUEIRAS, J. G.
rafael.bruno.lima@usp.br

Para uma real descrição de um sistema quântico temos sempre que considerar sua inevitável interação com o ambiente. Esta interação é um tema central de estudos relacionados da teoria de sistemas quânticos abertos (1) e implica no aparecimento de ruído, resultando na perda das características quânticas do sistema causado pela decoerência. Assim, entender e controlar os ruídos se torna peça fundamental na busca para o desenvolvimento de tecnologias baseadas na teoria quântica. Nos últimos anos, pesquisadores têm se dedicado a compreender a relação entra a perda de informação e a não Markovianidade (2), pois desta maneira é possível obtermos o retorno das características quânticas iniciais presentes no sistema. Neste trabalho, foi estudado como podemos gerar uma transição entre um regime Markoviano para um não Markoviano usando um sistema de dois níveis, através do controle do tempo de relaxação spin-rede de um qbit auxiliar, que atua como o ambiente. Para simularmos a decoerência presente no sistema, foi utilizado a formulação de canais quânticos. Além disso, foi discutido como os aspectos de não Markovianidade do sistema se comportam quando o mecanismo de relaxação é dinamicamente modificado pela ação de um campo magnético externo. Por fim, apresentamos uma demonstração experimental deste modelo, usando ressonância magnética nuclear em estado líquido. (3)

Referências:

1 BREUER, H. P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems** . Oxford: Oxford University Press, 2002. 2 RIVAS, A.; HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. Quantum non-Markovianity: characterization, quantification and detection. **Reports on Progress in Physics** , v. 77, n. 9, p. 094001-1-094001-26, 2014. 3 KONDO, Y. *et al.* Using the quantum Zeno effect for suppression of decoherence. **New Journal of Physics** , v. 18, p. 013033-1-013033-11, Jan. 2016. doi: 10.1088/1367-2630/18/1/013033.

259

PG155

Efeitos toxicológicos induzidos por nanopartículas de óxido de grafeno e óxido de cério em Ceriodaphnia silvestrii

TUESTA, M. A. M. ; ZUCOLOTTO, V.

monterotuesta@usp.br

As nanopartículas (NP) de óxido de grafeno (GO) e óxido de cério (nano-CeO2) apresentam propriedades físicas e químicas únicas que facilitam sua aplicação em áreas como eletrônica e biomedicina. (1-2) Inevitavelmente, essas NPs são liberadas e depositadas em ambientes aquáticos, como rios, lagos e oceanos, dessa forma, compreender as interações destas NPs dentro do sistema biológico é extremamente importante sendo um ponto chave tanto para a aplicação útil como para a regulação de nanomateriais. Como organismo de teste será adotado o *Ceriodaphnia silvestrii* , crustáceo braquiópode pertencente a subordem cladocera de ampla distribuição geográfica em toda a América do Sul e de relevância ecológica (organismo chave da cadeia alimentar aquática) em ecossistemas de água doce tropical e subtropical. *C. silvestrii* é uma espécie nativa com ciclo de vida curto, alta taxa reprodutiva, sensibilidade a contaminantes e de fácil cultivo sob condições controladas. (3) O objetivo deste estudo é investigar como NPs de GO e nano-CeO2 interagem com *C. silvestrii* através da avaliação de toxicidade aguda e crônica, levando em consideração parâmetros de imobilidade, reprodução, taxas de alimentação, geração de espécies reativas de oxigênio (ROS), ensaios enzimáticos e acúmulo de nanopartículas. Os resultados deste estudo ajudarão a entender os efeitos dessas NPs em cladóceros de água doce.

Referências:

1 KIM, H. Y. *et al.* In vivo visualization of endogenous mi R-21 using hyaluronic acid-coated graphene oxide for targeted cancer therapy. **Biomaterials** , v. 121, p. 144-154, Mar. 2017. doi: 10.1016/j.biomaterials.2016.12.028. 2 ASATI, A. *et al.* Surface-charge-dependent cell localization and cytotoxicity of cerium oxide nanoparticles. **ACS Nano** , v. 4, n. 9, p. 5321-5331, Sept. 2010. 3 JACONETTI, P. C. M. **Validação de ensaios ecotoxicologicos com organismos autoctones *Daphnia leavis* e *Ceriodaphnia silvestrii* .** 2005. 85 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Pesquisa Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.

260

PG156
Vidros fosfatos de íons alcalinos e alcalinos terrosos

MORGUETTO, G. F.
gabriel.morguetto@usp.br

Ao adicionarmos íons alcalinos em um sistema vítreo, o mesmo passa a apresentar condutividade iônica, tornando estes materiais interessantes para a aplicação em baterias e em sensores. No entanto, sabe-se que com mais de uma espécie iônica móvel presente no sistema, um mínimo na condutividade é observado (até seis ordens de grandeza menor que os sistemas com apenas uma espécie iônica) (1), além de não-linearidades em propriedades que dependem da difusão iônica no material. Um modelo que tenta explicar este efeito de íons mistos (EIM) é o "Random Ion Distribution Model" (RIDM), tendo como hipóteses a mistura aleatória das espécies móveis e a presença de sítios de ocupação estruturalmente diferentes para cada íon. (2) Neste projeto, verificaremos a validade das hipóteses do RIDM, perturbando um sistema vítreo com EIM intenso (Li-Cs metafosfato) com a adição de uma terceira espécie modificadora (Sr), procurando as condições para inibir o EIM associado à mistura dos íons alcalinos. Para tal, utilizou-se técnicas de ressonância magnética nuclear (RMN) de estado sólido, de calorimetria diferencial de varredura (DSC) e de espectroscopia de impedância (IE). Observamos linearidades nas larguras de linha espectrais dos núcleos de ^{7}Li e ^{133}Cs em função da densidade iônica dos mesmos. Para todas as razões Li-Cs, medimos comportamentos lineares, indicando que variações de qualquer um dos íons não afeta a diluição dos demais, indicativo da mistura aleatória dos íons, em conformidade com o RIDM. Além disso, através da IE, mostramos que o EIM continua presente após a adição de Sr, que atua como íon de bloqueio na difusão de Li e Cs, diminuindo a condutividade globalmente e deslocando o mínimo para a razão 0.25 Li:Cs.

Referências:

1 KARLSSON, C. *et al.* Ionic conductivity and the mixed alkali effect in LixRb(1-x)PO3 glasses. **Physical Review B** , v. 68, n. 6, p. 064202-1-064202-9, 2003. 2 SWENSON, J. *et al.* Random ion distribution model: a structural approach to the mixed-alkali effect in glasses. **Physical Review B** , v. 63, n. 13, p. 132202-1-132202-4, 2001.

261

PG157

Propriedades ópticas não-lineares e magneto-ópticas de vidro germanato dopado com térbio na forma bulk e fibra

HENRIQUE, F. R. ; ALMEIDA, J. M. P. ; FRANCO, D. F. ; NALIN, M. ; MENDONÇA, C. R.
francielerenata@usp.br

Fibras ópticas com propriedades magneto-ópticas são interessantes em aplicações como isoladores ópticos, rotores de Faraday, redes de Bragg, entre outras. Neste trabalho realizamos a caracterização das não-linearidades ópticas de terceira ordem de um vidro germanato dopado com térbio tanto em sua forma *bulk* quanto na forma de fibra óptica. A caracterização da amostra *bulk* foi feita através da técnica de Z-scan. (1) Nessa técnica, utilizamos um laser de femtossegundos (Ti:Safira, 60 fs, 790 nm, 1 kHz) focalizado na amostra que é movimentada em torno do foco por um estágio de translação motorizado. Um detector com uma fenda posicionado no campo distante é capaz de detectar pequenas distorções na seção transversal do feixe devido a efeitos de refração não-linear, em função da posição da amostra em relação ao foco. O índice de refração não linear, n_2, foi então obtido através do ajuste de curva de transmissão em função da posição da amostra e obtivemos o valor de $4,4 \times 10^{-20}\ m^2/W$, aproximadamente duas vezes maior que o valor da sílica. Devido à necessidade de se transladar a amostra em torno do foco da lente, a técnica de Z-scan não pode ser aplicada a fibras ópticas. Uma técnica alternativa, conhecida como D-scan (2), foi implementada com o objetivo de se realizar a caracterização não-linear de terceira ordem de fibras ópticas e guias de onda. Considerada como o análogo temporal do Z-scan, na técnica de D-scan a amostra permanece fixa e um laser de femtossegundos (Ti:Safira, 60 fs, 790 nm, 1 kHz) é acoplado através de uma lente objetiva à fibra de vidro germanato. O índice de refração não-linear é obtido através da análise das modificações espectrais no pulso de femtossegundos, provocadas pela automodulação de fase, para diferentes valores de dispersão inicial do pulso. Um compressor de pulsos constituído por dois prismas, sendo um deles móvel, é posicionado antes da objetiva de acoplamento, sendo responsável pela variação da dispersão inicial. A luz guiada pela fibra é coletada por outra lente objetiva e direcionada a um espectrômetro. Um pós-processamento dos espectros coletados é necessário como forma de se obter sua largura espectral. A curva da largura espectral em função da dispersão inicial nos fornece o n_2 da fibra através de um ajuste feito por uma simulação numérica, na qual obtivemos $5 \times 10^{-20}\ m^2/W$, valor próximo ao obtido para a amostra *bulk* . Também realizamos medidas de Efeito Faraday na amostra *bulk* , nas quais obtivemos constante de Verdet de -1573º/T.m, valor superior ao de vidros magnéticos comuns, como SF5 e SF6.

Referências:

1 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. 2 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, 1361-1363 p. 1999.

262

PG158
Efeitos de desordem em certos magnetos frustrados

MIRANDA, M. M. J. ; HOYOS, J. A.
michelmjmiranda@ifsc.usp.br

Magnetos frustrados possuem o estado fundamental altamente degenerado. Em alguns casos, flutuações térmicas ou quânticas levantam essa degenerescência selecionando estados específicos; um mecanismo conhecido por "ordem por desordem". (1-2) Um exemplo paradigmático onde esse fenômeno ocorre é o modelo de Heisenberg clássico em uma rede quadrada com acoplamento de primeiros (J_1) e de segundos (J_2) vizinhos. No regime onde $J_2 > |J_1|/2$, surpreendentemente, o estado fundamental do sistema independe de J_1 resultando em duas subredes desacopladas. Consequentemente, o estado fundamental é altamente degenerado com o ângulo entre as duas subredes parametrizando a sua degenerescência. Flutuações térmicas e quânticas levantam essa degenerescência escolhendo um estado em que as subredes se ordenam colinearmente entre si. (1-2) Entretanto, a presença de impurezas pode alterar como a degenerescência é levantada. No caso de vacâncias, o ordenamento anti-colinear entre as subredes é favorecido, dando origem a uma competição entre os mecanismos de ordem por desordem térmica e/ou quântica com o mecanismo de ordem por desordem induzido por vacâncias. Aqui, pretendemos estudar os efeitos de outro tipo de impureza: acoplamentos aleatórios que podem ser nucleados pela dopagem de átomos não-magnéticos na rede cristalina. Usando critérios de estabilidade termodinâmica (3), argumentamos que estas impurezas têm um efeito completamente distinto das vacâncias. Ao invés de algum estado com ordenamento entre as subredes ser selecionado, impurezas de acoplamentos aleatórios destroem qualquer ordenamento, mesmo em temperatura nula. Nossos resultados são corroborados com simulações de Monte Carlo onde não encontramos nenhuma assinatura de transição ou ordenamento entre as subredes do sistema.

Referências:

1 HENLEY, C. L. Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet. **Physical Review Letters** , v. 62, n. 17, p. 2056-2059, Apr. 1989. 2 CHANDRA, P.; COLEMAN, P.; LARKIN, A. I. Ising transition in frustrated Heisenberg models. **Physical Review Letters** , v. 64, n. 1, p. 88-91, Jan. 1990. 3 IMRY, Y.; MA, S.-k. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. **Physical Review Letters** , v. 35, n. 21, p. 1399-1401, Nov. 1975.

263

PG159

Statistical randomness tests with the TestU01 library for a hardware random number generator

CATANANTE, V. A. A. ; MERENDA, J. V. ; BATISTA NETO, J. E. S. ; BRUNO, O.
vaugusto@usp.br

Randomness is an important concept within the domain of systems and data security heuristics. Cryptography is an example, which may employ random number generators in order to retrieve a representation of data and prevent trivial access to it. The degree of security that a random number generator based cryptography procedure provides is related to how hard it is to compute the next and the previous numbers of an element on a sequence without knowing the seed - a mapping function. (1) A random number generator may work with a deterministic mapping function (which creates pseudo-random numbers) or a non-deterministic function. One example of a truly random number generator is a very basic hardware component: the resistor, which produces a random variation known as Thermal Noise due to the Brownian motion of electrons inside the conductor. (2) This work aims to evaluate the randomness of the thermal noise from resistors, capacitors and transistors by using the set of statistical tests implemented on the software library TestU01, known for its relevance within the field (3).

Referências:

1 KOCAREV, L. Chaos-based cryptography: a brief overview. **IEEE Circuits and Systems Magazine** , v. 1, n. 3, p. 6-21, 2001. 2 ZHUN, H.; HONGYI, C. A truly random number generator based on thermal noise. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ASIC, 4., 2001, Shangai. **Proceedings[...]** Beijing: IEEE, 2001. p. 862-864. 3 KOLONKO, M.; GU, F.; WU, Z. Improving the statistical quality of random number generators by applying a simple ratio transformation. **Mathematics and Computers in Simulation** , v. 157, p. 130-142, Mar. 2019. doi: 10.1016/j.matcom.2018.10.002.

264

PG160

Estudos biofísicos e estruturais das septinas de Drosophila melanogaster

FERNANDES, A. ; LEONARDO, D. ; PEREIRA, H. ; GARRATT, R. C.
adriano.fernandes@usp.br

As septinas são proteínas conhecidas originalmente por atuarem na formação do septo, estrutura responsável pelo estrangulamento no final da divisão celular e que separa em duas partes o conteúdo citoplasmático.(1) Septinas também possuem diversas outras funções celulares, sendo encontradas em fungos e animais, e ausentes em plantas. Apresentam como principais características um domínio conservado de ligação aos nucleotídeos de guanina (GTP/GDP) e a formação de filamentos homo- e hetero-oligoméricos, que são estruturas altamente organizadas. As septinas estão envolvidas em diversas funções celulares nas quais se encontram associadas à membrana plasmática, através do reconhecimento de fosfolipídeos específicospela região polibásica (hélice-α0).(1) Outros processos biológicos também são associados às septinas, como a citocinese, exocitose, fagocitose, tráfego de vesículas. O principal aspecto 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. Para os estudos de septinas deste trabalho foi escolhido como organismo modelo *Drosophila melanogaster* , ou mosca-da-fruta, que é uma espécie de inseto díptero. Esta espécie possui cinco genes codificantes às septinas SEPT1, SEPT2, SEPT4, SEPT5 e Pnut.(2) Apesar do conhecimento dos genes relativos às septinas de *Drosophila melanogaster* , ainda há carência em estudos da formação de complexos entre as proteínas que formam filamentos e/ou interactoma dessas moléculas, bem como em informações estruturais de alta resolução.(3) Deste modo, este estudo visa uma maior compreensão do mecanismo de interação das septinas de *Drosophila melanogaster* bem como a elucidação de suas informações estruturais por técnicas de caracterização biofísica e cristalografia de proteínas por difração de raios-X.

Referências:

1 HARTWELL, L. H.; CULOTTI, J.; REID, B. Genetic control of the cell-division cycle in yeast. I. Detection of mutants. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America** , v. 66, n. 2, p. 352-359, June 1970. 2 NEUFELD, T. P.; RUBIN, G. M. The *Drosophila peanut* gene is required for cytokinesis and encodes a protein similar to yeast putative bud neck filament proteins. **Cell** , v. 77, n. 3, p. 371-379, May 1994. 3 ADAM, J. C.; PRINGLE, J. R.; PEIFER, M. Evidence for functional differentiation among drosophila septins in cytokinesis and cellularization. **Molecular Biology Cell** , v. 11, n. 9, p. 3123-3135, Sept. 2000.

265

PG161

Influência do progresso tecnológico e renovabilidade na sustentabilidade do ecossistema populações de engenheiros

LOPES, G. ; FONTANARI, J. F.
guilherme2.lopes@usp.br

O ser humano possui a habilidade de modificar o ecossistema em sua volta para conseguir recursos para sua sobrevivência. Essa exploração se tornou inadequado devido o crescimento populacional, seguido do desenvolvimento de novas tecnologias.As discussões se a população pode entrar em colapso devido a taxa de exploração são antiga e sem resposta ou indícios. Contrastando com a abordagem usual para modelar as interações homem-natureza, que são baseadas no modelo predador-presa de Lotka-Volterra com os seres humanos como os predadores e a natureza como a presa, aqui abordamos essa questão usando um tempo discreto modelo de dinâmica populacional de engenheiros do ecossistema.Na modelagem de engenheiros do ecossistema, consideramos que o engenheiro modifica um ambiente virgem, o transformando em utilizável (por exemplo, fazendas). Após à exploração, o ambiente sofrerá um processo de regeneração, voltando a ser um ambiente virgem. Neste trabalho, o engenheiro é modelado pela equação de Beverton-Holt com a capacidade de exploração dependente da densidade de habitats utilizaveis. Na situação em que a regeneração é lenta, a dinâmica da população é denominada por ciclos de prosperidade e colapso, e que pode resultar em desaparecimento em certas ocasiões.Contudo, o aumento da eficiência de exploração (obter recursos com poucos ecossistemas) transforma a dinâmica em um ciclo estável. Para futuros estudos, o sistema será abordado no contexto de mapas acoplados, que consistem em uma discretização do tempo e do espaço.(1)

Referências:

1 FRANCO,C.; FONTANARI, J.F. The spatial dynamics of ecosystem engineers. **Mathematical Biosciences** ,v. 292, 76–85,2017.doi:10.1016/j.mbs.2017.08.002

266

PG162

Elementos do grupo 13 em Biovidros: uma análise pela técnica de rotação no ângulo mágico

SANTOS, M. L.
millena.santos@usp.br

A Ressonância Magnética Nuclear (NMR) de Sólidos demonstra ser uma excelente opção no estudo qualitativo e quantitativo da rede formadora de vidros, distribuição espacial dos formadores e modificadores de rede e polimerização da mesma.(1-2) Biovidros é um grupo específico de vidros de composição: $SiO_2 - CaO - Na_2 - P_2O_5$ que demonstraram ser aplicável na adesão ao osso sem formação de tecido fibroso, risco de toxidade ou promoção de inflação.(3) Uma possibilidade de aprofundar o entendimento da bioatividade, estabilidade mecânica e propriedades desses vidros é proposto pelo presente trabalho através da adição de elementos do grupo-13 ás matrizes biovítreas, sendo $27Al$, $11B$ e $71Ga$ os alvos de estudo desse grupo. Em amostras iniciais, a Técnica de Rotação ao redor do Ângulo Mágico (MAS) será usada e permite estudar tanto formador ($29Si$) quanto modificador ($27Al$) de rede através da caracterização do ambiente onde esses núcleos estão inseridos. Simulações das interações nucleares com o meio são feitas e levam em conta os Hamiltonianos do deslocamento químico anisotrópico, da interação quadrupolar, da interação dipolo-dipolo, entre outros. Tal estudo possibilita categorizar os números de coordenação de cada núcleo. Esse estudo nos leva enfim a intuir como rede está conectada viabilizando o entendimento inicial da integração estrutural do Alumínio na modificação da rede dos biovidros.

Referências:

1 MELCHERS, S. *et al*. Effect of aluminum ion incorporation on the bioactivity and structure in mesoporous bioactive glasses. **Chemistry of Materials** , v. 28, n. 10, p. 3254-3264, 2016. doi: 10.1021/acs.chemmater.5b04117. 2 HIROSHI, Y. *et al*. Nuclear magnetic resonance studies of alkaline earth phosphosilicate and aluminoborosilicate glasses. **Journal of Non-Crystalline Solids** , v. 270, n. 1-3, p. 48-59, 2000. 3 MONTAZERIAN, M.; ZANOTTO, E. D. Bioactive glass ceramics: processing, properties and applications. *In*: BOCCACCINI, A. R.; BRAUER, D. S.; HUPA, L. (ed.). **Bioactive glasses** : fundamentals, technology and applications. Londres: Royal Society of Chemistry, 2017. cap. 2, p. 27-60. (RSC smart material, 23).

267

PG163

Correlating morphology and geochemistry at the nanoscale with synchrotron imaging

PERES, L. M. C. ; GALANTE, D.
laramcp@usp.br

The development and application of novel analytical techniques for the study of ancient life on Earth is an important step for establishing the most suitable framework for the search of biosignatures of deep time in samples returned from Mars. One of the main challenges in the study of early life traces in our planet is that Precambrian cellular remains have simple morphologies, micrometric dimensions and are commonly poorly preserved, imposing stringent interpretational and analytical challenges for irrefutable attestations of biogenicity. In this context, the need for high-resolution imaging approaches and the capacity of integrating different lines of evidence face technical constrains of the resolution, contrast or penetration depth of most conventional imaging approaches. Here we report the 3D nanoscale integrative description of the morphology and geochemical composition of Precambrian microfossils using ptychographic X-ray computed tomography (1), a non-invasive imaging technique that provides quantitative electron density of materials in the nanoscale. (2) We analyzed a set of Precambrian microfossils of different morphologies and states of preservation and also traces of microbial mats. Our results provide the 3D morphology and electron density of both organic and mineral phases with an average resolution of 50 nm. This approach provides novel insights into the fossils ultrastructure and geochemical composition, with implications for the understanding of their biogenicity, paleo-ecology and taphonomy. This approach also provides a significant contribution to the debate of the biogenicity criteria for morphological biosignatures, and, given its non-destructiveness, nanometric-resolution and capacity to correlate morphology and identification of the phases at the nanoscale, it has the potential to be a standard technique to be applied in samples returned from Mars in the near-future.

Referências:

1 HOLLER, M. *et al.* X-ray ptychographic computed tomography at 16 nm isotropic 3D resolution. **Scientific Reports** , v. 4, p. 3857-1-3857-5, 2014. doi: 10.1038/srep03857. 2 DIAZ, A. *et al.* Three-dimensional mass density mapping of cellular ultrastructure by ptychographic X-ray nanotomography. **Journal of Structural Biology** , v. 192, n. 3, p. 461-469, Dec. 2015.

268

PG164

Investigation of photoinduced charge generation in surface-immobilized metal-organic-frameworks (SURMOFs) based on porphyrin derivatives and C60

LIMA, J. ; MIRANDA, P. B.
joaquimbrasil@ifsc.usp.br

Currently the most promising architecture for organic solar cells is the bulk heterojunction, which consists on dispersion of donor and acceptor molecules forming the active layer. (1) Aiming at advancing the fabrication of organic photovoltaic devices, we are investigating a new architecture based on a periodic arrangement of donor and acceptor molecules. They consist of polycrystalline metal-organic-frameworks assembled on a surface (SURMOFs) (2) where individual fullerene molecules (C60) are surrounded by a cage of donor molecules, like porphyrin derivatives (ZnTTP, in this case) that are complexed by metal cation centers. In a collaboration with a research team from the Karlshuer Institute of Technology (Germany), who provided the samples, we have used continuous-wave photoinduced absorption spectroscopy (cw-PA) to probe effective charge photogeneration on Surmofs. Measurements reveal a photoinduced absorption band in the near infrared due to long lived charged species that is assigned to - transitions of the porphyrin cation (3), indicating that charge transfer from donor to acceptor (ZnTPP cation, C60 anion) can occur in SURMOFs. Modulation-frequency-dependent spectroscopy at 750 nm points that photogenerated charges have lifetime of 160 µs, while intensity-dependent data indicates that the charge recombination is mainly monomolecular. This suggests that charge migration throughout the SURMOFs is limited. Measurements under similar conditions were performed on well-established devices based on polymer bulk heterojunction P3HT:PCBM (fabricated in our group at IFSC), revealing that photoinduced charge generation efficiency is about 40 times higher than that on Surmofs, while the lifetime of photogenerated species is shorter. Discrepancy of charge photogeneration efficiency may be due to larger molecular spacing on Surmofs. Although these results point to a low efficiency of solar cells that would be fabricated by these SURMOFs, their wide variety of molecular architectures could be explored to eventually lead to efficient devices.

Referências:

1 WONG, M. K.; WONG, K. Y. Investigation of the factors affecting the power conversion efficiency of all-solution-processed 'bilayer' P3HT:PCBM solar cells. **Synthetic Metals** , v. 170, p. 1-6, Apr. 2013. doi: 10.1016/j.synthmet.2013.02.021. 2 LIU, B. *et al*. Chemistry of SURMOFs: layer-selective installation of functional groups and post-synthetic covalent modification probed by fluorescence microscopy. **Journal of the American Chemical Society** , v. 133, n. 6, p. 1734-1737, 2011. 3 GOUTERMAN, M. Spectra of porphyrins. **Journal of Molecular Spectroscopy** , v. 6, p. 138-163, 1961. doi: 10.1016/0022-2852(61)90236-3.

269

PG165

Low-cost disposable screen-printed carbon based microfluidic electrochemical device for early diagnosis of colorectal cancer

NASCIMENTO, G. F. ; MATERON, E. M. ; REDIN, G. G. I. -. ; FARIA, R. C. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.

gustavo.nascimento@usp.br

The development of methodologies for early diagnosis of colorectal cancer (CCR) is relevant, since this type of cancer is the third in number of deaths in the world. (1) In this study, we developed an electrochemical biosensor to detect the bacterium Fusobacterium nucleatum (F. nucleatum), a microorganism whose strong relationship with CCR was recently discovered. (2) Specific DNA sequences for the recognition of F. nucleatum were immobilized in magnetic microparticles (dynabeads) for sample preconcentration, and employed in the detection. Disposable microfluidic devices based on carbon printed electrodes were used for the specific recognition of biomarkers with electrochemical techniques. Among the advantages of this electrode system is the use of small sample volumes, possibility of miniaturization and rapid analysis, which can generate a low-cost system for the early detection of CCR. To prove the efficiency of the detection, differential pulse voltammetry (DPV) technique was applied to provide a comparison between the changes that occur in the surface of the dynabeads during the process of construction and detection. The proposed devices were capable of detecting and differenciate the presence and the absence of complementary DNA down to 1 μM in buffer solution with good correlation (RSD = 7%).

Referências:

1 LIM, J. M. *et al.* Electrochemical peptide sensor for diagnosing adenoma-carcinoma transition in colon cancer. **Biosensors and Bioelectronics** , v. 98, p. 330-337, Dec. 2017. doi: 10.1016/j.bios.2017.07.013. 2 BULLMAN, S. *et al.* Analysis of *Fusobacterium* persistence and antibiotic response in colorectal cancer. **Science** , v. 358, n. 6369, p. 1443-1448, Dec. 2017.

270

PG166

Photodegradation kinetics of Indocyanine Green in the infrared region

TOVAR, J. S. D. ; KASSAB, G. ; INADA, N. ; BAGNATO, V. ; KURACHI, C.
johandiaz1@ifsc.usp.br

Indocyanine green (ICG) is a water soluble anionic tricarbocyanine dye which has been widely used for biological applications. (1) The photodegradation kinetics and aggregation of ICG were studied in aqueous solution by absorbance spectrum measurements. Air-saturated and N2-bubbled solutions of ICG in PBS and distilled water were investigated. Two excitation wavelengths were used, 780 and 808 nm. The photodegradation analysis was performed based on the number of absorbed photons and rate equations of the electronic excited states. The aggregation effect is influenced by the diluent medium and also a third emission band at 640 nm, associated with PBS solution, could be observed. This new emission band is associated to a trimeric band, when ICG is diluted in PBS. ICG in the lack of oxygen degradated, suggesting that oxygen is not the only pathway of degradation.(2)The degradation of the solution with aggregated forms does not follow the Beer-Lambert law. (3) The exposure to light increases the degradation rates. The photodegradation rates were distinct between the two excitation wavelengths.

Referências:

1 DI NEZZA, F. *et al*. Thermodynamic properties and photodegradation kinetics of indocyanine green in aqueous solution. **Dyes and Pigments** , v.13,p. 342-347,2016. 2 ABELS,C. *et al*. Indocyanine green (ICG) and laser irradiation induce photooxidation. **Archives of Dermatological Research** , v.292, n.8, p. 404–411,2000. 3 GERALDE,M. C. e*t al*.Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumination : an experimental model. **Physiological Reports** , v.5, n.5, p. 13190, 2017.

271

PG167

Mode filtering effect in graphene oxide-doped microcavities fabricated by two-photon polymerization via direct laser writing

TOMAZIO, N. B. ; PAULA, K. T. ; HENIQUE, F. R. ; RODRIGUEZ, R. D. F. ; ANDRÉS, M. ; MENDONCA, C. R.

nathalia.tomazio@usp.br

Graphene oxide (GO) has gained attention in the graphene family owing to its optical and electrical properties.(1) Moreover, it is low-cost and water-soluble compared to graphene, thus holding a great potential for large-scale and cost-effective production of graphene-based materials. GO-based composites have been exploited for several applications, including ultrafast lasers, optical limiting and multimode optical recording and have been realized mostly in thin films.(2) However, the development of GO-based composites from polymers used for direct laser writing, which would enable the fabrication of 3D photonic micro/nanodevices, has been far less explored. In this work, we investigate the mechanisms underlying a mode filtering effect observed in polymer microcavities containing graphene oxide aiming at the development of on-chip integrable photonic devices. We have fabricated the microcavities by means of two-photon polymerization via direct laser writing.(3) They exhibit good structural quality and smooth sidewall surfaces (cavity loaded Q-factor of 2×10^4 at 1550 nm). The presence of graphene oxide in the microcativities is confirmed by Raman spectroscopy. To investigate the influence of saturable absorption in the GO-doped microcavities, we carried out nonlinear measurements through the femtosecond Z-scan technique with excitation at 1550 nm. By modeling the photo-carrier dynamics with a two-level system, we found the saturation intensity to be 500 MW/cm^2, which is three orders of magnitude higher than the intracavity intensity achieved with the pump levels employed to excite the microcavities. This result shows that the mode filtering effect may be prompted by other mechanisms. We have been currently studying the influence of thermal optical nonlinearities by Z-scan technique carried out with continuous-wave excitation and our preliminary results suggest that laser-induced thermal lens effects may be playing a major role in the mode filtering observed in the GO-doped polymer microcavities.

Referências:

1 BONACCORSO, F. *et al*, Graphene photonics and optoelectronics. **Nature Photonics** , v. 4, n. 9, p. 611-622, 2010. 2 STANKOVICH, S. *et al*, Graphene-based composite materials. **Nature** , v. 442, n. 100, p. 282-286, 2006. 3 TOMAZIO, N. B. *et al*. Femtosecond laser fabrication of high-Q whispering gallery mode microresonators via two-photon polymerization. **Journal Polymer Scence Part B** : polymer Physics, v. 55, n.7,p. 569-574, 2017.

272

PG168

Caracterização estrutural da proteína nsP4 RNA polimerase RNA-dependente do vírus Chikungunya e busca por agentes antivirais

FREIRE, M. C. L. C. ; GODOY, A. S. ; BUENO, R. V. ; OLIVA, G.

marjorie_freire_@hotmail.com

A febre Chikungunya, causada pelo vírus Chikungunya (CHIKV), é uma arbovirose transmitida para humanos através da picada de mosquitos do gênero Aedes sp. Os principais sintomas da fase aguda são febre, exantema, vômitos, edemas, além de dores articulares e musculoesqueléticas. A doença também apresenta uma fase crônica, caracterizada pela persistência das dores articulares por meses ou até anos, debilitando o paciente. (1) Até o momento não existe um tratamento específico contra a infecção viral. Portanto, existe a necessidade de se intensificar estudos que possam levar a novos candidatos a fármacos ou vacinas contra este vírus. O CHIKV é um vírus de RNA de cadeia positiva, do gênero Alphavirus, cujo material genético codifica duas poliproteínas; uma estrutural e outra não estrutural. Após clivadas essas dão origem a nove proteínas maduras. Destas, três formam o envelope viral (E1, E2 e E3), uma o capsídeo (proteína C), e outras quatro proteínas não estruturais (nsP1, nsP2, nsP3 e nsP4) estão envolvidas no processo de replicação genoma viral. (2) A proteína não estrutural nsP4 é a RNA-Polimerase RNA-dependente (RdRp), que é considerada a principal proteína do complexo de replicação viral, exercendo papel crucial neste processo. Dessa forma, a nsP4 é considerada um interessante alvo para a busca e o desenho de novos fármacos inibidores e até o momento a sua estrutura tridimensional não foi elucidada. (3) Neste contexto, este projeto propõe a elucidação estrutural e a caracterização funcional da proteína nsP4, bem como a busca por ligantes que possam atuar como potenciais inibidores. Como resultados iniciais, foram realizadas as etapas de clonagem, expressão em larga escala em sistema heterólogo (E. coli) e purificação através de técnicas cromatográficas, possibilitando a obtenção da proteína pura. A nsP4 pura foi utilizada para a realização de ensaios de cristalização e algumas condições cristalizantes encontram-se em processo de otimização, visando obter cristais viáveis para os experimentos de difração de raio-X.

Referências:

1 STAPLES, J. E.; BREIMAN, R. F.; POWERS, A. M. Chikungunya fever: an epidemiological review of a re-emerging infectious disease. **Clinical Infectious Diseases** , v. 49, n. 6, p. 942-948, 2009. 2 HERNANDEZ, R.; BROWN, D. T.; PAREDES, A. Structural differences observed in arboviruses of the alphavirus and flavivirus genera. **Advances in Virology** , v. 2014, p. 259382-1-259382-24, 2014. doi: 10.1155/2014/259382. 3 RASHAD, A. A.; MAHALINGAM, S.; KELLER, P. A. Chikungunya virus: emerging targets and new opportunities for medicinal chemistry. **Journal of Medicinal Chemistry** , v. 57, n. 4, p. 1147-1166, 2014.

273

PG169

Effects of antineoplastic agents delivery by plasma membrane-derived nanoparticle on neoplastic cells and immunoregulatory properties on professional antigen presenting cells.

COMPARETTI, E. ; ZUCOLOTTO, V.
edsoncomparetti@gmail.com

Cancer is the most recurrent chronic diseases in the world. (1) In this scenario, human pancreatic carcinoma is amid the neoplasias with the highest number of deaths, and the frequency of relapses demand novel therapeutic intervention. (1) The present study aims the development of nanocarriers to transport two first-line drugs used in clinical treatment (gemcitabine and paclitaxel) into tumor cells using the main components from plasma membrane of pancreatic neoplasms. In cancer cell line and healthy cell, nanoparticles were tested in vitro for particle internalization, and cytotoxic activity of Gemcitabine/Paclitaxel incorporated on nanocarriers. Moreover, particles were labeled with fluorescein isothiocyanate, a fluorescent substance used to evidence internalization by target cells. In order to observe particle specificity, nanocarriers were exposed to PANC-1 cells (human pancreatic tumor), HEPA-RG cells (healthy phenotype liver cell line) and peripheral blood monocytes from healthy donors. Adhesion/internalization was investigated by flow cytometry and the cytotoxic activity of immobilized drug was analyzed by methyl tetrazolium (MTT) reduction and cell viability by Annexin V (apoptosis) and 7AAD (cell death) labeling. The main factor that contributes to neoplastic cells growth and expansion is their ability to modulate tumor microenvironment and evade immune surveillance. (2) Nanocomposites can prevent the production of immunosuppressive cytokines and increase the activity of the main mechanisms of cellular immunity. (3) We also study the nanocarriers ability to carrier immunomodulatory agents, both inside tumor cells and immunocompetent cells. Therefore, nanoparticles were used to deliver antineoplastic agents to cancer cells and antigenic material to antigen presenting cells to modulate the activity of immune system, establishing a pro-inflammatory response in tumor sites.
Acknowledgements: FAPESP (2018/12670-4), CNPq (142285/2017-0).

Referências:

1 BRAY, F. *et al.* Global cancer statistics 2018: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. **CA** : a cancer journal for clinicians, v. 68, n. 6, p. 394-424, Nov./Dec. 2018. 2 BEATTY, G. L.; GLADNEY, W. L. Immune escape mechanisms as a guide for cancer immunotherapy. **Clinical Cancer Research** , v. 21, n. 4, p. 687-692, Feb. 2015. 3 SONG, H. *et al.* Injectable polypeptide hydrogel for dual-delivery of antigen and TLR3 agonist to modulate dendritic cells in vivo and enhance potent cytotoxic T-lymphocyte response against melanoma. **Biomaterials** , v. 159, p. 119-129, Mar. 2018. doi: 10.1016/j.biomaterials.2018.01.004.

274

PG170

Automação de um frontEnd de RMN para controle de periféricos em baixa velocidade

MONTES, R. S.
rafael.silva.montes@usp.br

O desenvolvimento de técnicas de ressonância magnética tem se mostrado fundamentais pois elas têm grande aplicabilidade na indústria, em análises clínicas, no estudo morfológico da estrutura do material, entre outros. É uma técnica não invasiva que permite análises e observações de substâncias presentes no corpo de teste. (1) Assim, o desenvolvimento de um espectrômetro com ampla aplicabilidade, como o desenvolvido pelo grupo CIERMag, tem ampla relevância. Os sinais gerados pelo espectrômetro passam por um FrontEnd que faz uso de uma técnica que envolve a utilização de múltiplos canais, necessitando de circuitos para intermediar as transmissões e recepções dos sinais captados e gerados. No momento da atuação de uma aplicação deve-se ter o controle de diversas variáveis que podem interferir nos resultados obtidos ou mesmo danificar os equipamentos, como, por exemplo, alterações da temperatura da bobina de gradiente, o controle de uma cama ou outro periférico que seja essencial para uma determinada aplicação entre outros. Dessa maneira, este projeto desenvolverá um dispositivo de controle dos sensores, dispositivos periféricos e do FrontEnd, no caso desse último, para obter um maior domínio sobre as atribuições dos sinais dos canais de recepção e de transmissão e atribuir atenuações para os transmissores e receptores da maneira que um usuário desejar.

Referências:

1 SOUZA, P. V. B. D. **Desenvolvimento de um subsistema non-real-time para o gerenciamento de dispositivos periféricos e desenvolvimento de interfaces gráficas** . 2016. 120 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

275

PG171

Caracterização de proteínas relacionadas à síntese e degradação do segundo mensageiro c-di-GMP em Pseudomonas aeruginosa

DELPHITO, L. ; NAVARRO, M.
leonardodelphito@usp.br

A regulação de diferentes processos celulares importantes de bactérias, como progressão do ciclo celular, formação de biofilme, mobilidade e virulência é realizada pelo dinucleotídeo cíclico c-di-GMP. (1) Dentre esses processos, a transição do estilo de vida livre para o biofilme possui grande relevância médica, sendo estimado que 80% das doenças bacterianas em humanos são infecções biofilme-associadas. A formação do biofilme é vantajosa por conferir as bactérias: proteção física do sistema imune e de antibióticos, adesão para formar sítios de infecção e coordenação para expressão simultânea de fatores de virulência, entre outras. (2) Descrito pela primeira vez em 1987, o segundo mensageiro c-di-GMP é sintetizado intracelularmente, dado um estímulo externo ou interno, a partir de duas moléculas de GTP. Tal síntese ocorre por intermédio de diguanilato ciclases (DGCs) que possuem o domínio GGDEF, e a degradação da molécula é realizada por fosfodiesterases (PDEs) com domínio EAL ou HD-GYP. Uma vez sintetizado ele atua alostericamente sobre moléculas efetoras que agem sobre alvos que conduzirão a uma resposta fenotípica, como por exemplo: formação de flagelo, transcrição de genes, produção de exopolímeros da matriz do biofilme. Vários efetores são controlados por esse mesmo mensageiro, o que levanta a questão de como um estimulo específico leva a uma resposta específica, sendo que o c-di-GMP, uma vez sintetizado, poderia se difundir por todo o citoplasma e interagir com diversos efetores gerando as mesmas respostas independente do estímulo. (1) Hipóteses surgiram para tentar explicar como a especificidade nesse sistema de sinalização ocorre: poderia ser decorrente de síntese localizada próxima ao efetor seguida de degradação do c-di-GMP logo após a interação; ou decorrente da afinidade de cada efetor ao c-di-GMP; ou de uma rede de interações entre as diversas proteínas que sintetizam, degradam e recebem o c-di-GMP; ainda uma combinação dessas hipóteses também seria possível. (1,3) Alguns estudos apontam para a existência dessa rede de interações protéicas. (3) Objetivando ajudar a elucidar o mecanismo desse mensageiro bacteriano esse projeto busca a caracterização da estrutura, atividade e interação das proteínas com domínios PAS, GGDEF e EAL, PA0169, PA3825, PA0285 e PA0575 que, a partir de estudos in vivo, interagem com força significativa e devem fazer parte dessa provável rede de interação de proteínas.

Referências:

1 RÖMLING, U.; GALPERIN, M. Y.; GOMELSKY, M. Cyclic di-GMP: the first 25 years of a universal bacterial second messenger. **Microbiology and Molecular Biology Reviews** , v. 77, n. 1, p. 1-52, 2013. 2 FLEMING, D.; RUMBAUGH, K. P. Approaches to dispersing medical biofilms. **Microorganisms** , v. 5, n. 2, p. 15-1-15-16, 2017. 3 SARENKO, O. *et al.* More than enzymes that make or break cyclic Di-GMP: local signaling in the interactome of GGDEF/EAL domain proteins of *Escherichia coli* . **mBio** , v. 8, n. 5, p. e01639-17-1-e01639-17-18, 2017.

276

PG172

Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente

FORTUNATO, T. C. ; MORIYAMA, L. T.
therezacury@gmail.com

Quando a luz incide sobre um tecido biológico, 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 mesmo.(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 conhecido que a cor, hidratação e rugosidade da superfície do tecido possam influenciar na propagação da luz. Neste trabalho foram realizadas simulações computacionais da interação da luz com um meio túrbido homogêneo cujas propriedades ópticas são equivalentes às da derme da pele. As simulações foram feitas utilizando a implementação do método de Monte Carlo desenvolvida por FANG denominada Monte Carlo eXtreme (MCXLAB).(2) O objetivo do presente estudo é avaliar como a propagação da luz dentro do meio túrbido depende do acoplamento da luz em sua superfície. Para isso, nas simulações, considerou-se a existência de uma camada de material acima do meio túrbido, com diferentes características ópticas. Os resultados mostram que a adição de algum tipo de material acima do meio túrbido altera o formato da propagação da luz, de forma que podemos otimizar os parâmetros para melhorar entrega da luz.

Referências:

1 NIEMZ, M. H. **Laser-tissue interactions** : fundamentals and applications. New York: Springer Science Business Media, 2013. 2 FANG,Q. ; BOAS,D. Monte Carlo simulation of photon migration in 3D turbid media accelerated by graphics processing units. **Optics Express** , v. 17, p.20178-20190,2009.doi: 10.1364/OE.17.020178.

277

PG173
Isolantes topológicos

ZANON, J. ; EGUES, J. C.
julianzanon9@gmail.com

Isolantes topológicos são sólidos que ao mesmo tempo se comportam como isolantes e metais, i.e., têm superfícies metálicas (sem "gap") e são isolantes em bulk (com "gap"). Ao contrário de um pedaço de borracha coberto com um filme metálico (o que se aproximaria do conceito de um isolante topológico), um isolante topológico apresenta "naturalmente" estados quânticos metálicos na sua superfície e/ou borda e, mais importante, estes estados quânticos são protegidos contra (retro) espalhamento por desordem, impurezas não magnéticas etc. e portanto potencialmente não dissipam energia. Como descrito nas publicações originais e com mais detalhes nos excelentes artigos de revisão sobre o tema (e.g.),(1-2), , este comportamento exótico se deve essencialmente a efeitos relativísticos – interação spin órbita e o termo de massa-velocidade – os quais dão origem a inversões de bandas de energia.Este trabalho de mestrado possui como foco explorar e generalizar os modelos prévios de isolantes topológicos ("BHZ model") para incluir supercondutividade e possivelmente descrever experimentos recentes reportando observação de supercondutividade nos estados de borda em isolantes topológicos 2D. Entretanto, devido ao curto período que tive, visto que entrei no mestrado neste primeiro semestre, será apresentado uma breve introdução sobre os isolantes topológicos através do efeito hall quântico inteiro, no qual é manifestado o efeito da resistência hall ser quantizada, da mesma maneira que a condutividade.

Referências:

1 QI, X.L.; ZHANG,S.C. Topological insulators and superconductors. **Review of Modern Physics** , v.83, n.4,p.1057,2011. 2 HASAN, M. Z.; KANE, C. L. Colloquium: topological insulators. **Review of Modern Physics** , v.82, n.4, p.3045,2010.

278

PG174

Toxicidade e respostas bioquímicas em Daphnia magna exposta a nanopartículas de óxido de cobre e de platina

ANDRADE, L. S. ; CHIQUITO, J. G. G. ; ZUCOLOTTO, V. ; DORNFELD, A. S. M.
leticia_silvaandrade@hotmail.com

Nanopartículas de óxido de cobre (NPs CuO) e de platina (NPs Pt) são amplamente utilizadas em várias aplicações industriais e comerciais devido às suas interessantes propriedades físicas e químicas. O aumento do uso e produção destas nanopartículas contribui para a presença destes contaminantes nos ecossistemas aquáticos, podendo causar toxidade aos organismos desses sistemas. (1) Diante disso, o objetivo deste estudo foi avaliar a toxicidade e as respostas bioquímicas de estresse oxidativo no cladócero *Daphnia magna* exposto às NPs de óxido de cobre e de platina. Para isso, testes de toxicidade aguda e determinação dos níveis de espécies reativas de oxigênio (ROS) foram realizados com os cladóceros em concentrações subletais das NPs selecionadas. Os resultados da concentração efetiva mediana (C 50) para as NPs CuO e as NPs Pt foram de 0,09 mg Cu $^{-1}$ e de 10,0 mg Pt $^{-1}$, respectivamente. Também se notou a acumulação e a adsorção das NPs Pt no corpo dos cladóceros, principalmente nos apêndices filtradores e na carapaça do animal, o que pode prejudicar as atividades de reprodução, alimentação e proteção desses organismos. (2) A produção de ROS foi medido nos tecidos dos cladóceros logo após exposição às NPs e resultou em um aumento significativo nas concentrações de 0,02 mg Pt L^{-1} e 0,04 mg Pt $^{-1}$ de NPs Pt e nas concentrações de 0,02 mg Cu $^{-1}$ e 0,03 mg Cu $^{-1}$ de NPs CuO. De acordo com os resultados de ROS no organismo é provável que haja alterações na atividade enzimática antioxidante devido ao estresse oxidativo nas células. (3) Os dados obtidos até o momento apontam para os possíveis riscos ecológicos em populações de cladóceros com a contaminação dos sistemas aquáticos por nanopartículas de CuO e de Pt.

Referências:

1 NGO, C.; van de VOORDE, M. **Nanotechnology in a nutshell**: from simple to complex systems . Paris: Atlantis Press, 2014. 2 ADAM, N. *et al.* The uptake of ZnO and CuO nanoparticles in the water-flea *Daphnia* magna under acute exposure scenarios. **Environmental Pollution** , v. 194, p. 130-137, Nov. 2014. doi: 10.1016/j.envpol.2014.06.037. 3 MWAANGA, P. *et al.* The induction of biochemical changes in *Daphnia magna* by CuO and ZnO nanoparticles. **Aquatic Toxicology** , v. 150, p. 201-209, May 2014. doi: 10.1016/j.aquatox.2014.03.011.

279

PG175

Construction of a quantum degenerate mixture of sodium and potassium atoms to produce quantum turbulence

GUTIERREZ, E. D. M. ; MAZO, P. ; SALCEDO, E. G. I. ; FARIAS, K. M. ; BAGNATO, V. S.
emmanuel.dv@usp.br

In this work, we present the state of the art of our experiment for a mixture of Na and K Bose-Einstein Condensates. The specific case of Na-K mixtures is of particular interest due to its large flexibility, with Bose-Bose and Bose-Fermi mixtures could be produced by changing the potassium isotope and the different miscibility regimes, explored with the tuning of the interspecies interactions via the Feshbach resonances for each combination. (1) We are going to investigate effects related to two different species as effects of transferring quantum excitations, vortices and lattices formation, and quantum turbulence, as well using this flexibility. Our experimental system is a composition of two independently atomic sources attached to the main chamber, which is the Science chamber. We produce magneto-optical traps (MOT) of Na and K atoms from 2D MOTs, which utilize a novel Zeeman slower configuration. For the case of K, it is the first time that technique is implemented. We are running the Na BEC from an Optical Trap and started first experiments on Lattices Vortices formation. Results also related to K will be presented here, as the process using Gray Molasses (2) to deeply cooling, which is a necessary procedure to mixture both species.

Referências:

1 CHIN, C. *et al.* Feshbach resonances in ultracold gases. **Reviews of Modern Physics** , v. 82, n. 2, p. 1225-1286, Apr. 2010. 2 CHEN, H.-Z. *et al.* Production of large 41K Bose-Einstein condensates using D1 gray molasses. **Physical Review A** v. 94, n. 3, p. 033408-1-033408-6, Sept. 2016.

280

PG176
Fontes Locais de Raios Cósmicos Ultra Energéticos

OLIVEIRA, C. ; SOUZA, L. V.
caina.oliveira@usp.br

Mesmo após um século desde seu descobrimento, a origem dos raios cósmicos continua sendo um dos grandes mistérios da ciência contemporânea. Os mecanismos de aceleração de raios cósmicos ultra energéticos (UHECR) são ainda desconhecidos, bem como as fontes que os originam. Entretanto, em 2018 a colaboração do Observatório Pierre Auger (PAO) demonstrou que os UHECR, com energias acima de $10^{18}\ eV$, apresentam origem extragalática, tendo portanto, de se propagar por distâncias astronômicas antes de atingirem a Terra. (1) Durante o processo de propagação, o espectro injetado pela fonte sofre atenuação devido à: perda de energia de forma adiabática consequente da expansão do universo; interações com radiações de fundo cósmico que resultam em perdas de energia via fotoprodução de píons, fotoprodução de pares e^-e^+, e, no caso de núcleos, fotodesintegração. Estes mecanismos, além de modificarem o espectro emitido pela fonte astrofísica, tanto em relação à energia quanto em relação à composição, produzem fluxos adicionais de neutrinos e raios gama. (2-3) Este projeto tem por objetivo buscar fontes locais de UHECR, tais como a radio galáxia Centaurus A, por meio de uma abordagem multi-mensageiro que envolve simulações do fluxo de partículas que chegam à Terra após a propagação: núcleos, neutrinos e gama. Os cálculos dos fluxos que chegam à Terra estão sendo feitos utilizando o software CRPropa3.0, que realiza a propagação de núcleos, neutrinos, fótons, elétrons e pósitrons. Nele, estão implementados os processos de perdas de energia acima descritos, além de diversos modelos de radiação de fundo extragalática (EBL) e distribuições de fontes. Também é possível escolher a composição dos primários emitidos pela fonte, se a propagação será unidimensional, tridimensional ou quadrimensional, acoplando ou não campos magnéticos. Nesta primeira abordagem do problema, calculou-se o fluxo de neutrinos produzidos pelo ajuste combinado do PAO, com índice espectral 0.87, energia de corte de $10^{18.62}\ eV$, com composição na fonte de 77 % N e 23 % Si. (3) Utilizando tais dados, produziu-se o fluxo de neutrinos gerados por tal espectro e comparou-se o resultado com as sensibilidades de experimentos atuais e futuros: IceCube (2018), Auger (2017), ARA, ARIANNA, GRAND e POEMMA (em 3 anos). (2) Com tais dados, nota-se que o fluxo de neutrinos vindo da propagação não será medido pelos experimentos atuais (IceCube, Auger) ou previstos para 3 anos.

Referências:

1 AAB, A. *et al.* Observation of a large-scale anisotropy in the arrival directions of cosmic rays above 8×10^{18} eV. **Science** , v. 357, n. 6537, p. 1266-1270, 2017. 2 DAS, S.; RAZZAQUE, S.; GUPTA, N. Ultrahigh energy cosmic rays and neutrinos from light nuclei composition. **Physical Review D** , v. 99, n. 8, p. 083015-1-083015-18, 2019. 3 AAB, A. *et al.* Combined fit of spectrum and composition data as measured by the Pierre Auger Observatory. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics** , v. 2017, n. 4, p. 038-1-038-40, Apr. 2017.

281

PG177

Artificial neural networks and complex networks: an integrative study of topological properties and pattern recognition

SCABINI, L. ; BRUNO, O.
leonardo.f.scabini@gmail.com

Artificial neural networks (ANN) and Complex networks are gaining attention nowadays due to advances in artificial intelligence, computer hardware, and big data phenomena. Recent deep ANN architectures have been achieving outstanding performance on various problems, which led to the proposal of many models. However, due to the lack of knowledge of its internal functioning, these techniques are used as a black box approach. For instance, it is possible to produce images that are completely unrecognizable by humans, but which deep convolutional networks strongly believe to be recognizable objects.(1)New studies are then needed regarding the functioning of these networks, contributing to the development of more robust and interpretable models. An interesting alternative is to analyze ANN as complex systems, such as a complex network. It was shown(2) that an ANN with a small-world topology performs better than traditional fully-connected networks for the diagnosis of diabetes. Moreover, complex network measures show some correlation with the function of the deep belief ANN neurons.(3) In this context, we propose a study to improve the understanding of ANN through complex networks and we hypothesize that the system topology plays a crucial role in its overall functioning. To achieve that, the ANN elements are modeled as a complex network considering the active interaction between its entities (neurons). The topological properties of the system are analyzed with the goal of establishing correlations between its structural organization and functioning. Our first analysis considers deep feedforward ANN as directed graphs, where connections point towards the propagation of information (forward) from the input to the output layer. We then analyze the correlation between two topological measures (input and output strength) of the hidden layers with the network performance (accuracy rate). Results using 1000 ANN with different random initial weights trained in two different datasets indicates a strong correlation between the network accuracy and the average strength of hidden neurons. This indicates the existence of topological elements responsible to improve the network performance. For instance, in our case networks with higher accuracy have hidden neurons with negative average input and output strength, while networks with low accuracy show the opposite. We then believe that there are other network properties related to its internal functioning, such as other centrality and path-based measures. The continuation of this research will then focus on the elaboration of new methods to improve ANN architectures according to our findings regarding its topology properties.

Referências:

1 NGUYEN, A.; YOSINSKI, J.; CLUNE, J. Deep neural networks are easily fooled: high confidence predictions for unrecognizable images. *In*: IEEE CONFERENCE ON COMPUTER VISION AND PATTERN RECOGNITIONM cvpr, 15, 215. **Proceedings[...]** Boston, Massachussetts, 2015.p. 427–436. 2 ERKAYMAZ, O.; OZER, M. Impact of small-world network topology on the conventional artificial neural network for the diagnosis of diabetes **Chaos, Solitons Fractals** , v.83, p.178–185, 2016. doi: 10.1016/j.chaos.2015.11.029. 3 TESTOLIN, A.; PICCOLINI, M.;SUWELS, S. **Deep learning systems as complex networks.** 2018. Disponivel em:arXiv preprintarXiv:1809.10941. Acesso em: 19.06.2019.

282

PG178

Skyrmions auto duais a partir do ansätze conforme e mapa racional

LIVRAMENTO, L. R. ; FERREIRA, L. A.
leandrorl@ifsc.usp.br

O modelo de Skyrme (1-2) é uma teoria efetiva não linear para o tripleto de píons em 3+1 dimensões no regime de altas energias, sendo sua ação definida em termos do campo de Skyrme o qual pertencente ao grupo SU(2). O caráter topológico do modelo pode ser capturado em uma quantidade conservada chamada de carga topológica que pode ser interpretada como número de nucleons. Uma extensão do modelo de Skyrme pode foi realizada em (3) através da introdução de um matriz 3×3 real e simétrica acoplada ao termo quadrático nas derivadas espaço-temporais do campo SU(2) e sua inversa acoplada ao termo quártico, introduzindo mais seis graus de liberdade ao sistema. Tal generalização do modelo de Skyrme preserva a estrutura topológica do modelo e dá a ele um setor auto dual, onde se pode procurar por soluções estáticas através das equações de auto dualidade. As equações de auto dualidade são equações diferenciais de primeira ordem que automaticamente implicam nas equações de segunda ordem de Euler-Lagrange e saturam o limite inferior da desigualdade de Bogomolny, o que garante que as soluções auto duais são as soluções de mínimo global de energia. Contudo, em (3) foram apenas construídas soluções de carga unitária para modelo de Skyrme extendido. Neste trabalho se determinará o comportamento da matriz responsável pela extensão do modelo dentro do setor auto dual e se construirá soluções exatas de carga topológica arbitrária através dos ansätze mapa racional, utilizado para se construir soluções aproximadas do modelo de Skyrme original, e do ansatz toroidal construído a partir de combinações entre as simetrias internas e externas da ação do modelo de Skyrme extendido.

Referências:

1 SKYRME, T. H. R. A nonlinear field theory. **Proceedings of the Royal Society A** , v. 260, n. 1300, p. 127-138, 1961. 2 SKYRME, T. H. R. Particle states of a quantized meson field. **Proceedings of the Royal Society A** , v. 262, n. 1309, p. 237-245, July 1961. 3 FERREIRA, L. A. Exact self-duality in a modi[U+FB01]ed Skyrme model. **Journal of High Energy Physics** , v. 2017, n. 7, p. 039-1-039-12, July 2017.

283

PG179

Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas humanas

LEONARDO, D. A. ; NASCIMENTO, A. ; ANDRÉ, I. ; VALADARES, N. ; WATANABE, T. ; USON, I. ; GARRATT, R. C.

dleonardo@usp.br

Septinas são proteínas envolvidas em vários processos celulares e para desempenhar suas funções, pelo menos três dos quatro grupos diferentes devem se associar para formar heterofilamentos formando dois tipos de interface: a interface G e NC. (1) Embora o tipo de interface de contato e a ordem específica das septinas na montagem do filamento sejam conhecidos, os mecanismos moleculares que controlam a polimerização correta do filamento ainda são desconhecidos. (2) Aqui, descrevemos estudos realizados nas interfaces G e NC de septinas para descobrir os determinantes estruturais da especificidade da interação. As combinações "G"de septinas foram purificadas para serem caracterizadas usando técnicas biofísicas, mostrando dímeros em solução com a presença de GTP/GDP. Os dímeros exibem uma estabilidade térmica diferente, o que pode indicar preferências durante a formação do complexo. Essa condição foi estudada com o MST, demonstrando que não há diferença significativa nas constantes de dissociação, o que reforça a ideia de substituição entre septinas no mesmo grupo. Nos estudos de interface "NC", as estruturas dos coiled-coils nas septinas 1, 4 e 5 foram resolvidas. Uma orientação antiparalelo foi observada para SEPT1 e SEPT4, com um lado hidrofílico e um lado hidrofóbico (um novo motivo ainda não relatado), enquanto o coiled-coil de SEPT5 tem uma orientação paralela (com interface de contato clássico). Isso sugere que essas sequências podem adotar as duas orientações, o que poderia explicar a formação de estruturas de alta complexidade, como redes de filamentos que foram observadas *in vivo* e em imagens TEM.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M. *et al*. Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature** , v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007. 2 KINOSHITA M. *et al*. Self- and actin-templated assembly of mammalian septins. **Developmental Cell** , v. 3, n. 6, p. 791-802, 2002.

284

PG180
Buracos negros primordiais interagindo com cordas cósmicas

GREGORIO, G. ; HARTMANN, B.
gustavo.gregorio@usp.br

Cordas cósmicas são defeitos topológicos que provém de cenários inflacionários como a GUT. Acredita-se que as cordas cósmicas podem estar ligadas a teoria das cordas fundamentais da Teoria das Cordas. Na última década, modelos inspirados em cordas assumindo o modelo padrão de campos (e nosso mundo 4-dimensional) como sendo confinado em uma brana com três dimensões espaciais em um espaço tempo de dimensões maiores.(1) Esse modelo inspira cenários de inflação que quase sempre prevêem a produção de cordas em seu final. Se assumirmos que a escala da quebra de simetria na transição de fase na qual as cordas cósmicas são formadas é bem menor do que a escala de Planck, é possível linearizar as equações de campo de Einstein e determinar os efeitos gravitacionais das cordas. No caso de cordas retilínias e estáticas no limite de cordas finas a métrica pode ser dada explicitamente e pode ser combinada com a solução exata de simetria cilíndrica das equações de Einstein. Com isso, o espaço tempo ao redor da corda é locamente plano mas globalmente cônico, com a coordenada angular variando de de 0 a $2(1-4G\mu)$, com G sendo a constante de Newton e μ a energia por unidade de comprimento da corda. É possível encontrar soluções para buracos negros perfurados por cordas cósmicas pela solução de Schwarzschild, diferindo do caso esfericamente padrão substituindo a variável angular por β, com β sendo relacionado ao ângulo deficitário. Nesse caso o espaço tempo deixa de ser unicamente determiado pela massa, passa a ser descrito também por esse parâmetro do ângulo deficitário. Como uma teoria atualmente aceita é a de que o espectro Gaussiano (quase) invariante por escala da CMB tem sua origem no período inflatório do início do universo e os modelos inflacionários predizem a produção de cordas cósmicas e de pequenos buracos negros primordiais, a interação entre cordas cósmicas e buracos negros é de interesse ser estudada. O Objetivo central desse estudo é a interação entre cordas cósmicas e buracos negros primordiais usando modelos teóricos de campo (2), discutindo técnicas numéricas, o estabelecimento de condições no horizonte e a construção de soluções.

Referências:

1 RANDALL, L.; SUNDRUM, R.An alternative to compactification. **Physical Review Letters** , v.83, n.23,p. 4690,1999. 2 ACHUCARRO, A.; GREGORY, R.; KUIJKEN, K. Abelian higgs hair for black holes. **Physical Review D** , v. 5, n.10, p.5729,1995.

285

PG181

Development of a technique combining photobiomodulation and radiotherapy to enhance the tumoral response to ionizing radiation

FARIA, C. ; PRATAVIEIRA, S. ; INADA, N. M. ; BAGNATO, V. S.

claramgf@ifsc.usp.br

Photobiomodulation (PBM), a technique that is being used for over 40 years, is based on applying light in order to modify cellular processes such as proliferation, tissue regeneration and analgesia. These effects are strong evidences that PBM can modulate the cell cycle and increase tissue oxygenation, which are determinant factors in a radiotherapy result (1). Therefore, in this project, the investigation of the combination of these techniques to the development of a protocol that enhances tumor damage and treatment efficacy is proposed. In vitro experiments will enable the study of PBM in cell proliferation and cell cycle and its combination with radiotherapy, using the 3-(4,5-dimethylthiazol)-2,5-diphenyltetrazolium bromide (MTT) assay and flow cytometry. From these experiments the protocols for in vitro analysis will be determined. An oral cavity cancer model will be applied, using the human squamous cell carcinoma cells SCC-25, and in vivo tumor induction will be performed in hairless mice. The aim of these experiments is the evaluation of the techniques combination in a model of higher biological complexity and the analysis of tumor damage and animal survival in order to propose a protocol that enhances the cancer response to ionizing radiation.

Referências:

1 BALCER-KUBICZEK, E. K. Apoptosis in radiation therapy: a double-Edged sword. **Experimental Oncology**, v. 34, n.3,p. 277–85.,2012.

PG182

Diagnóstico de doenças em citros por meio de DeepLearn combinado a imagens de espectroscopia de fluorescência

NEVES, R. ; WETTERICH, C. ; SOUSA, E. P. M. ; MARCASSA, L.

ruan.neves@usp.br

O Objetivo foi criar um modelo computacional (1) capaz de diferenciar e diagnosticar de maneira precisa qual doença dentre as principais, que são: i) Cancro Cítrico; ii) Greening; iii) Verrugose; e iv) Deficiência de Zinco (2); que acometem uma determinada arvore produtora de citros a partir de uma imagem obtida por meio de espectroscopia de fluorescência (2) de uma folha sintomática. A partir do uso de um conjunto de LEDs de alta potência em 405 nm para realizar a excitação a amostra, combinado a um filtro passa banda de 690 nm foram coletadas imagens de 100 amostras de folhas sintomáticas de cada uma das doenças acima citadas. Estas imagens foram submetidas a um algoritmo de DeepLearn baseado em redes neurais convolucionais e conceitos de TransferLearning (3), onde foram utilizadas 90% delas para treinamento e 10% para teste para a busca da configuração ideal de pesos da rede por meio de técnicas de busca exaustiva. Por meio do uso de algoritmos de força bruta foi encontrado o resultado de 95% de precisão pelo método das redes neurais convolucionais, contra resultados passados que não atingiam os 80%. Concluí-se que O método se mostrou altamente eficiente obtendo resultados os quais podem ser aplicados ao campo e muito superiores aos métodos clássicos da literatura e aos foram utilizados em trabalhos anteriores da área, alcançando uma precisão muito alta mesmo se tratando de uma classificação multiclasses, algo que é extremamente custoso e difícil de se realizar.

Referências:

1 NISBET, R.; ELDER, J. F.; MINER, G. **Handbook of statistical analysis and data mining applications** . Amsterdam: Elsevier, 2009. 2 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. 3 CHOLLET, F. *et al*. **Keras** .2015. Disponivel em:https://keras.io/getting-started/faq/.Acesso em: 05 ago.2019.

287

288

Índice de Autores

A
ABATE, G. 34
ABREU, F. M. O. 56
AFONSO, R. J. S. 176
AGUERA, J. J. M. 188
AGUIAR, A. C. 150, 179
ALMEIDA, G. F. B. 190
ALMEIDA, I. C. 144
ALMEIDA, J. 38
ALMEIDA, J. M. P. 78, 262
ALMEIDA, L. 181
ALMEIDA, S. 179
ALVARENGA, J. P. V. 67
ALVAREZ, C. 89
ALVES, F. 175
ALVES, G. A. S. 105
AMANCIO, E. 158
AMBROSIO, A. L. B. 239
ANDRÉ, I. 284
ANDRÉS, M. 272
ANDRADE, E. 120
ANDRADE, E. C. 61, 144
ANDRADE, L. S. 47, 279
ANDRICOPULO, A. D. .54, 146, 195, 224, 227
ANTHONY, G. R. V. 177
ANTONIO, L. 94
APRILE, N. 208
AQUINO, L. 206
ARAÚJO, A. P. U. 174
ARAÚJO, R. N. 223
ARAUJO, G. 204
ARBELETCHE, L. 106
ARGENTIN, M. N. 166
ARNOLDI, V. 255
ASNIS, Y. 85
AUGUSTO NETO, G. 131, 236
AYALA, E. P. 175
AZEVEDO, É. C. 115
AZEVEDO, E. R. 259

B
B.MASS, E. 54
BACHELARD, R. 139, 187
BAGNATO, V. 70, 225, 271
BAGNATO, V. S. . .48, 71, 79, 80, 86, 89, 109, 112, 126, 128, 135, 138, 175, 207, 230, 280, 286
BARBOSA, M. 201
BARRA, A. L. C. 252
BASTOS, C. M. O. 180
BATISTA NETO, J. E. S. 264
BATISTA, G. 50
BELI, C. 202
BELLINI, N. K. 216
BELOTTI, H. 74
BELTRAMINI, L. M. 99
BENATTI, A. 117
BERETA, S. J. 173
BERNARDES, A. 192
BERNARDI, J. C. 56
BESSE, R. 129
BIRAL, E. J. P. 113
BITTENCOURT, H. 148
BLANCO, K. 230
BLANCO, K. C. 59, 225
BOITO, D. 149, 245
BOITO, D. R. 123
BONAGAMBA, T. 231
BONAGAMBA,, T. T. J. 246
BONI, L. 34, 46, 78, 133, 140, 141
BORALLI, C. 29
BORALLI, C. M. S. 104
BORGES, A. G. C. 42
BORGES, L. 187

BOSSOLAN, N. R. S. 151, 166
BOTTI, L. C. L. 65
BRIGANTI, L. 160
BRIHAYE, Y. 101
BRITO, F. 182
BRITO, F. B. 259
BRUNO, O. 67, 234, 264, 282
BRUNO, O. M. 51, 222
BUENO, R. V. 273
BUZKEM, A. L. 186
BUZZÁ, H. H. 79

C
CÔNSOLI, P. 120
CAFACE, R. 103
CALDERÓN, G. L. 177
CAMARGO, A. S. S. 209
CAMARGO, I. L. B. C. 29, 99, 104, 110
CAMPANA-FILHO, S. P. 186
CAMPOS, C. P. 49
CAMPOS, T. I. T. B. 89
CANAL, G. 85
CANCINO-BERNARDI, J. 107, 167
CARACANHAS, M. 96, 173, 257
CARDOSO, C. 218
CARDOSO, M. 178
CARLOS, F. S. 34
CARMO, R. S. 247
CASIQUE, C. M. 178
CASTILHO, P. C. M. 131, 236
CASTRO NETO, J. C. 62, 72, 76, 82, 132, 136, 153, 156
CASTRO, T. 40
CATANANTE, V. A. A. 51, 264
CATUNDA, T. 58
CAVALLINI, D. 156
CECILIO, N. G. 39
CELESTINO, C. 162
CENTURION, H. A. 124
CERQUEIRA, M. 233
CHAVIGURI, J. R. H. 96
CHEROBIN, E. 143
CHERUBIM, C. 182
CHIQUITO, J. G. G. 47, 279
CILLI, E. M. 99
CLEMENTINO, L. O. D. 235
COCCA, L. Z. 133
COLUCCI, R. 127
COMIN, C. H. 55
COMPARETTI, E. 274
CONSOLE, F. 221
CORRÊA, A. S. 220
CORRÊA, D. 140
CORRÊA, T. Q. 86
CORREA, A. 179
COSTA, C. S. 48
COSTA, F. C. 192
COSTA, G. G. G. 58
COSTA, L. 238
COSTA, L. F. 55, 117, 256
COURTEILLE, P. 187, 202
COURTNEAY, J. 186
CUNHA, G. D. G. 32

D
D'ALMEIDA, C. P. 90, 91, 184
DABUL, A. N. G. 110
DAMACENO, L. C. G. 58
DEFFNER, S. 182
DEFFUNE, E. D. 135
DELPHITO, L. 276
DEMARCO, R. 118, 143, 191
DETILE, L. 88
DIAS, M. V. B. 244
DINIZ, P. 158
DIPOLD, J. 38
DOMINGUES, G. S. 97
DONATO, M. H. F. 249
DORNFELD, A. S. M. 47, 279
DOTTA, M. A. V. O. 192
DUARTE, A. C. G. O. 89

E
EGUES, J. C. 223, 278
ELLENA, J. A. 39, 88, 95
ESTRADA,, R. R. A. 246
EUCLYDES, M. J. 177
EVANS, T. 85

F
FARIA, C. 286
FARIA, C. M. G. 48
FARIA, G. C. 64, 127, 215
FARIA, R. C. 270
FARIA, W. 209

290

FARIAS, K. M. 131, 236, 280
FEITOSA, P. 90, 184
FERNANDES, A. 265
FERNANDES, R. S. 50
FERNANDEZ, M. F. 232
FERRARI, A. L. R. F. 57
FERREIRA, A. G. A. 246
FERREIRA, C. 162
FERREIRA, F. 237
FERREIRA, G. C. 79
FERREIRA, J. F. 151
FERREIRA, L. A. 170, 283
FERREIRA, L. L. G. 146
FERREIRA, P. R. 78
FERREIRA, S. 238
FIGUEIREDO, B. 31
FILGUEIRAS, J. G. 259
FIUSA, G. 53
FOERSTERA, B. U. 218
FONTANARI, J. F. 125, 266
FORTUNATO, T. C. 277
FRANCISCO, G. 103
FRANCO, D. F. 262
FREIRE, M. C. L. C. 273
FURUTA, R. H. M. 41

G
GÁMEZ, Y. M. 128
GALANTE, D. 188, 268
GALINDO, D. D. M. 34
GAMBOA, C. A. G. 222
GARBUIO, M. 207
GARCIA, É. B. 86
GARCIA, M. 74, 175
GARCIA, R. 46
GARRATT, R. C. 68, 174, 203, 265, 284
GASPAROTTO, A. 38
GIL, L. H. V. G. 50
GODOY, A. 185
GODOY, A. S. 111, 154, 244, 273
GODOY, R. S. 64
GONÇALVES, D. 142
GONÇALVES, P. J. 141
GONÇALVES, R. V. 105, 124
GONÇALVES, T. S. 209
GRANATO, J. E. 68
GREGORIO, G. 63, 285
GUIDO, R. 150, 179
GUIDO, R. V. C. 192
GUIMARÃES, F. E. G. 32, 156, 186, 241
GUIMARÃES, F. E. G. G. 135
GUIMARÃES, S. L. 174
GUIMARAES, F. E. G. 161
GUO-QIANG, H. 31
GUTIERREZ, E. D. M. 236, 280
GUTIERREZ, E. M. 131
GUTIERREZ, R. F. 253

H
HARTMANN, B. 63, 101, 194, 208, 221, 285
HEMMERLING, M. 70, 71
HENIQUE, F. R. 272
HENN, E. 158
HENN, E. A. L. 37, 44
HENRIQUE, F. R. 262
HIGASI, P. 255
HILARIO, A. 165
HOYOS, J. A. 263

I
IBÁNEZ-REDÍN, G. 142
IERMAK, I. 49
INADA, N. 225, 271
INADA, N. M. 49, 98, 107, 112, 126, 207, 286

J
JO, J. 145
JOCHELAVICIUS, K. 200
JOHNS, M. 186

K
KÜHL, K. 62
KADOWAKI, M. 185
KANE, A. O. 226
KASSAB, G. 126, 271
KESSLER, H. 202
KURACHI, C. 77, 93, 112, 126, 128, 145, 271

L
LAISSENER, B. S. 72
LAPIERRE, R. R. 121
LARSEN, B. 73
LEÃO, M. 205
LEAL JUNIOR, J. M. 210
LEAL, A. C. S. 246
LEAL, T. C. 99

291

LEITE, A. E. T. 248
LEITE, I. S. 107
LEONARDO, D. 265
LEONARDO, D. A. 284
LIMA, A. 158
LIMA, A. L. 197
LIMA, J. 269
LIMA, M. P. 129
LIMA, R. B. B. 259
LIMA, V. R. 98
LINS, P. M. P. 167
LIVRAMENTO, L. R. 283
LONDON, C. Y. M. 123
LOPES, G. 266
LOPES, J. L. S. 99
LOPES, M. 172
LUCAS, T. A. 66
LUCCAS, G. A. A. 82
LUCHESI, A. C. 234
LYLES, Z. 107

M
MACHADO, L. A. 71
MADEIRA, L. 80
MAFUD, L. C. G. 112
MAGALHÃES, L. G. 54, 195
MAGNO, G. F. 137
MAIA, L. 204, 242
MALAVAZZI, H. 170
MALUF, F. V. 192
MANOEL, D. S. 141
MARCASSA, L. 217, 287
MARCASSA, L. G. 178
MAREGA, E. 211
MARINHO, F. 188
MARINO, Á. V. M. 80
MARQUES, M. J. A. M. 49
MARTINEZ, V. J. 44
MARTINS, C. T. 54
MARTINS, E. B. 116
MARTINS, M. J. 250
MARTINS, R. D. S. 251
MARTINS, T. 199
MARTINS, T. T. 214
MARTINS, W. 61
MATERON, E. M. 270
MATIAS, P. 228
MATTOS, V. S. 156
MAYUMI, N. I. 128
MAZO, P. 131, 236, 280
MAZZIERO, M. L. 55
MEDEIROS, A. R. 227
MENCATTINI, I. 40
MENDES, L. 213
MENDES, T. 210, 233
MENDONÇA, C. 140
MENDONÇA, C. R. 38, 141, 190, 262
MENDONÇA, D. C. 174
MENDONCA, C. R. 272
MENEGHELLO, R. 219
MERCANTE, L. 140
MERENDA, J. V. 51, 264
MESQUITA, N. C. M. R. 244
MEZZACAPPO, N. F. 207
MION, W. 135
MIOTTI, M. 70
MIOTTI, M. P. 71
MIRANDA, B. R. 95
MIRANDA, M. M. J. 263
MIRANDA, M. M. P. 211
MIRANDA, P. B. 168, 269
MIRANDA, W. M. 212
MISOGUTI, L. 60, 155
MONTES, R. S. 275
MONTRAZZI, E. 231
MORAIS, F. O. 76
MORAZOTTI, N. A. C. 171
MORENO, M. 202
MORGUETTO, G. F. 261
MORIYAMA, L. T. 277
MOTA, D. 118
MOURA, R. 69
MOUSSA, M. H. Y. 196
MOYSÉS, R. 60
MULINARI, E. J. 243
MUNIZ, J. 181
MUNIZ, J. R. C. 243
MUNIZ, S. 199, 214, 249, 251

N
NAKADA, P. J. T. 77
NAKAMURA, A. 185
NALIN, M. 262
NAPOLITANO, R. J. 165, 171

292

NARDI, L. M. C. 114
NASCIMENTO, A. 284
NASCIMENTO, A. S. 115, 252–254
NASCIMENTO, G. F. 270
NAVARRO, M. 276
NAVARRO, M. V. A. S. 219
NAVES, C. B. 52
NEVES, G. A. 245
NEVES, R. 287
NIRO, C. 103
NOLASCO, L. K. 190
NOSKE, G. D. 111, 154
NUNES, F. S. 34
NUNES, M. C. C. 34

O
OITICICA, P. R. A. 122
OLIANI, F. 149
OLIVA, G. 50, 111, 154, 179, 244, 273
OLIVEIRA JUNIOR, O. N. . 122, 142, 152, 164, 169, 200, 270
OLIVEIRA NETO, F. 196
OLIVEIRA, A. O. 72, 76, 136
OLIVEIRA, B. P. 230
OLIVEIRA, C. 281
OLIVEIRA, C. E. 240
OLIVEIRA, E. A. B. 37
OLIVEIRA, E. E. L. 246
OLIVEIRA, G. A. 131, 236
OLIVEIRA, K. I. Z. 244
OLIVEIRA, L. N. 57
OLIVEIRA, L. O. 76, 136
OLIVEIRA, N. P. 90, 91, 184
OLIVEIRA, V. G. F. 111, 154
ONO, B. A. 186, 251
OROZCO, A. D. G. 109
OTÁVIO, B. S. 177

P
PAIVA, F. F. 218
PALMA, N. B. 168
PAOLILLO, F. R. 89, 156
PARIZOTTO, N. A. 89
PASSAGEM, H. 217
PASSAGEM, H. F. 178
PASTORE, A. M. 159
PAUL, E. C. 178
PAULA, K. T. 272
PAULI, I. G. 87
PEREIRA, H. 265
PERES, L. M. C. 268
PIGUEL, S. 133
PINTO, D. O. S. 176, 247, 259
PINTO, F. F. J. 241
PIRES, L. 77
POLIKARPOV, I. 160, 185, 248, 255
PORTUGAL, R. V. 174
PRATAVIEIRA, S. ... 74, 90, 91, 175, 184, 286
PUSEP, Y. 121

Q
QUATRONI, F. D. 33

R
RABELO, L. 66
RAIA NETO, M. 65
REDIN, G. G. I. -. 270
REIS, R. 35
RESENDE, B. M. F. 256
REYES, G. M. 107
RIBOVSKI, L. 94
RICARTE, A. 81
RIGHETTO, G. M. 99
ROCHA, T. S. 45
RODRIGUES, F. A. 119
RODRIGUES, M. V. 30
RODRIGUEZ, R. D. F. 272
ROGÉRIA, R. G. 177
ROMANO, R. 93, 145
ROMANO, R. A. 77
ROSA, R. 145
ROSSI, V. 102
RUGGIERO, C. A. 228, 237
RUSSOSWKY, D. 54

S
SÁ, A. A. C. 231
SALA, F. A. 45
SALAZAR, J. R. M. 169
SALCEDO, D. L. P. 195
SALCEDO, E. G. I. 131, 236, 280
SALHANI, J. A. S. 125
SALVIO, A. G. 145
SAMPAIO, I. 33
SANTO, T. S. E. 139
SANTOS FILHO, N. A. 99

293

SANTOS, A. L. 98
SANTOS, D. M. 186
SANTOS, F. E. A. 113
SANTOS, K. F. 152
SANTOS, M. C. 98
SANTOS, M. L. 267
SANTOS, S. 38
SANTOS, S. C. 98
SARRETA, Y. 153
SARRIA, J. J. H. 169
SCABINI, L. 282
SCARPIN, J. A. 131, 236
SCIUTI, L. 140
SCOTT, J. L. 186
SEGATO, F. 243
SEGURA, C. 199, 214
SHARMA, R. 186
SHIOZAKI, R. 202
SILVA, C. C. 114
SILVA, E. M. G. 54
SILVA, G. R. 98
SILVA, G. V. 29, 104, 110
SILVA, J. F. L. 180
SILVA, J. L. F. 129
SILVA, K. O. O. 59
SILVA, M. A. P. 156
SILVA, M. T. A. 197
SILVA, P. 199
SILVA, P. F. 214
SILVA, R. M. 203
SILVA, S. S. 126
SILVA, W. 181
SIPAHI, G. 258
SIPAHI, G. M. 87, 180
SIQUEIRA, A. 75, 258
SMAIRA, A. F. 138
SOARES, A. C. 98
SOARES, J. 59
SOARES-PINTO, D. 102, 137, 213
SOUSA, E. P. M. 287
SOUSA, S. C. 254
SOUZA, A. V. G. S. M. 135
SOUZA, G. 93
SOUZA, G. E. 150
SOUZA, H. R. 242
SOUZA, J. O. 179
SOUZA, L. M. 207
SOUZA, L. V. 106, 281
SOUZA, M. A. A. 132
SOUZA, M. S. 146
SOUZA, P. V. B. D. 250
SOUZA, R. F. S. 215
SOUZA, T. G. B. 155
SOUZA, V. 53
STELMATCHUK, L. 134

T
TAKEDA, C. S. 194
TAKEUTI, N. 84
TANIMOTO, C. 239
TANNÚS, A. 148, 250
TAVARES, B. 121
TAVARES, P. E. S. 131, 236
TEIXEIRA, J. 228
TELES, H. 224
TELLES, G. D. 71, 80, 116, 138
THIEMANN, O. H. 45, 134, 197, 205, 216
TOMA, C. 101
TOMAZIO, N. 140
TOMAZIO, N. B. 272
TOMISHIYO, G. 257
TORRES, M. L. 178
TORRES, N. U. 192
TOVAR, J. S. D. 126, 271
TRAVIESCO, G. 172
TRAVIESO, G. 237
TUESTA, M. A. M. 260

U
USON, I. 284

V
VALADARES, N. 284
VANZELLA, D. 157, 201
VENTURA, P. C. 119
VENTURINI, F. 84
VICENTE, M. L. 103
VICENTE, M. L. F. 92
VIDOTO, E. L. G. 148, 250
VITALINO, R. 66
VIVERO-ESCOTO, J. L. 107
VOLLET FILHO, J. D. 42, 112, 128

W
WATANABE, T. 284

294

WESTIN, R. 157
WETTERICH, C. 287
WRENGER, C. 253

Y
YASUOKA, F. M. M. 62, 156

Z
ZAGO, L. A. 161
ZANGIROLAMI, A. C. 225
ZANON, J. 278
ZANUTO, V. S. 64
ZAPATA, J. C. B. 164
ZENATTI, L. 110
ZUCOLOTTO, V. 33, 47, 56, 84, 94, 167, 260, 274, 279
ZUNIGA, G. A. L. 244
ZUVANOV, L. 191

295

296

297

PATROCÍNIO

LAC
Artigos para Laboratório
Tel.: (16) 3397-9060

THORLABS

APOIO

IFSC UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

FAFQ

SBIifsc