LIVRO DE RESUMOS

SIFSCJ

DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - USP

2021

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2021

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

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
Artur Barbedo
Beatriz Kimie de Souza Ito
Beatriz Souza Castro
Carolina Salgado do Nascimento
Edgard Macena Cabral
Fernando Camargo Soares
Gabriel dos Reis Trindade
Gabriel dos Santos Araujo Pinto
Gabriel Henrique Armando Jorge
Giovanna Costa Villefort
Inara Yasmin Donda Acosta
Humberto Ribeiro de Souza
João Hiroyuki de Melo Inagaki
Kelly Naomi Matsui
Leonardo da Cruz Rea
Letícia Cerqueira Vasconcelos
Natália Carvalho Santos
Nickolas Pietro Donato Cerioni
Vinícius Pereira Pinto

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
(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2021.
412 p.
Texto em português.
1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Titulo

ISBN 978-65-993449-3-0 CDD 530

Carta de apresentação

A Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos - SIFSC chega em sua décima primeira edição. Este é um evento organizado por alunos de graduação e pós graduação, com apoio da diretoria e de todos os servidores do instituto. Esta é a segunda edição da SIFSC no modelo virtual, devido a pandemia de COVID-19, que nos afastou do contato presencial e do ambiente universitário.

No entanto, mesmo no formato virtual, a SIFSC continuou a oferecer palestras acadêmicas, *talks*, sessão de pôsteres, minicursos e atividades culturais. A nossa programação procurou trazer palestras que dialogassem com temas de pesquisa desenvolvido por pesquisadores do mais alto nível de reputação. Pudemos contar com os seguintes eventos:

- *Missões Espaciais para o estudo de Astroparticulas Ultra-energéticas*, com a Profª Angela Olinto (University of Chicago)
- *Dinâmica de Redes em Grafeno*, com o Prof. Ado Jório (Universidade Federal de Minas Gerais)
- *Dispositivos Sensores para Detecção de Biomarcadores e o Diagnóstico de Doenças*, com o Prof. Ronaldo Censi Faria (Universidade Federal de São Carlos)

Outro tipo de evento interessante que procuramos trazer para dentro do nosso Instituto, são os *talks*. Estes se diferem das palestras acadêmicas por não se basearem em pesquisas, mas em experiências pessoais e discussões gerais. Damos espaço para que pesquisadores, professores e alunos compartilhem um pouco de sua vida e exponham sua opinião sobre diferentes aspectos da vida de um físico. Os *talks* realizados nesta edição foram:

- *Conversa com Docentes*, com os professores do IFSC-USP: Luiz Nunes de Oliveira, Ana Paula Araújo, Cleber Mendonça e Francisco Alcaraz.
- *Financiamento das Universidades Brasileiras*, com o Prof. Glaucius Oliva (IFSC-USP), Profª Soraya Smaili (UNIFESP) e Profª Cláudia Linhares (UFC)
- Yvonne Através do Tempo, com a Profª Yvonne Primerano Mascarenhas

Como de costume, uma das principais atrações da SIFSC é o Workshop da Pós-Graduação, já em sua 25ª 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 29º 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. Este ano, incluímos uma categoria de Divulgação Científica como uma forma de incentivo aos alunos e pesquisadores do nosso Instituto a desenvolver trabalhos de extensão acadêmica que busquem divulgar o conhecimento produzido dentro dos nossos muros.

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 11

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Introdução aos métodos de Monte Carlo quântico e suas aplicações na física nuclear
LIMA, M.; MADEIRA, L. 33

IC2 - Estudo da microfabricação com pulsos de femtossegundos em vidros Teluretos
BUOZZI, M. T.; SANTOS, S. N. C. 34

IC3 - Armadilha bidimensional arbitrária para gases atômicos degenerados
CASTILHO, P. C. M.; CUNHA, P. H. C. 35

IC4 - Investigação semiclássica de armadilhamento magneto-óptico com número reduzido de feixes de luz
ALVARENGA, L. N. C.; HENN, E. 37

IC5 - Identificando as fronteiras da física
FONSECA, M. S.; COSTA, L. F.; BENATTI, A.; ARRUDA, H. F. 38

IC6 - A malha mais curta ligando cidades: algoritmos bio-inspirados
FLORENTINO, B. R.; FONTANARI, J. F. 39

IC7 - Aumento de fluorescência induzida por agregados em derivados de benzotiadiazolas: um estudo em misturas de solventes
AKIYAMA, J.; BONI, L.; COCCA, L. Z.; GALINDO, D. M. 40

IC8 - Screening de compostos em linhagem tumoral metastática de próstata
COSTA, F. R. F.; SOUZA, M.; ANDRICOPULO, A. D. 41

IC9 - A implementação do AFORS-HET na simulação de diagramas de bandas de heterojunções de semicondutores nanoestruturados aplicados na fotocatálise da água para geração de H2
ZAMPAULO, L. G. T.; GONÇALVES, R. V. 43

IC10 - Bases da teoria da representação e aplicações em física
PINTO, V. P.; MENCATTINI, I. 44

IC11 - Avaliação automática de redações em português usando redes neurais
PENTEADO, M. Z. C.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 45

IC12 - Processos epidêmicos em redes temporais
CAMACHO, R. T.; RODRIGUES, F. A. 46

IC13 - Avaliação de compostos em patógenos bacterianos multirresistentes como parte do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos - CIBFar
CARNIELLI, G. V.; CAMARGO, I. L. B. C.; CARVALHO, I.; KALA, D. R. B. 47

IC14 - Microfabricação com pulsos de femtossegundos em vidros magnéticos
MENEZES, B.; SANTOS, S. N. C.; HENRIQUE, F. R.; MENDONÇA, C. R. 49

IC15 - Modelagem tight-binding do twisted bilayer graphene
PIETRO, N.; SIPAHI, G. 50

IC16 - Estudos ópticos espectroscópicos lineares e não lineares em uma nova classe de porfirinas
NASCIMENTO, C. S.; BONI, L. 51

IC17 - Autolesão sob a perspectiva dos profissionais da educação
SOUZA, Y. T.; FONTANARI, J. F. 53

IC18 - Aplicação e estudo de lentes de Moiré para o transporte de átomos
AGOSTINHO, E. T.; MARTINEZ, V. J.; HENN, E. 54

IC19 - Espectroscopia de um feixe atômico de Disprósio
OLIVEIRA, J. P. R.; HENN, E. 55

IC20 - Infecção por SARS-CoV-2 em pacientes com faringotonsilite aguda inclusos em protocolo de tratamento com terapia fotodinâmica
GRANDIN FILHO, P. G.; BLANCO, K. 57

IC21 - Funcionalização e caracterização de sonda uretral com fotossensibilizador do tipo curcumina: potencial ação fotoantimicrobiana no trato urinário
DUARTE, L. S.; BAGNATO, V. S.; DIAS, L. D. 59

IC22 - Revisão dos principais avanços no estudo da interação de septinas com membranas
FACIOLI, M. L.; ARAÚJO, A. P. U. 61

IC23 - Avaliação in vitro da possibilidade de disseminação da resistência bacteriana aos carbapenêmicos mediada pelo gene blaKPC através de conjugação
CARVALHO, I.; CAMARGO, I. L. B. C.; BORALLI, C. M. S. 62

IC24 - Estudo da interação da melanina com o ultrassom de baixa intensidade
SOUZA, M. O.; PRATAVIEIRA, S. 64

IC25 - Síntese e caracterização de grafeno induzido por um laser de CO2 utilizando materiais poliméricos comerciais
SILVA, P. A.; MASTELARO, V. R.; KOMORIZONO, A. A. 65

IC26 - A complexidade das espécies e a arquitetura de genes que codificam proteínas em eucariotos
REIS, R.; KOIDE, T. 67

IC27 - Conservação e evolução de sítios de splicing
REIS, R.; KOIDE, T. 68

IC28 - DFT investigation of the stability mechanisms of 8-atom binary clusters using machine learning
MORAIS, F. O.; SILVA, J. L. F.; ANDRIANI, K. F. 69

IC29 - Estudos de toxicidade de nanorods para aplicações em nanomedicina
PEREIRA, J. A.; ZUCOLOTTO, V.; LINS, P. M. P. 70

IC30 - Simulações computacionais para melhor compreensão da distribuição espacial de matéria escura
TOMÉ, F. A.; SOUZA, V. 71

IC31 - Simulando sinal de ressonância magnética com FPGA
SANTOS, C. 72

IC32 - Reconstrução de modelos radiativos de fontes de raios gama na região do centro galáctico
MOMESSO, D. C.; VIANA, A. 73

IC33 - Estudo de uma nanoemulsão de porfirina e seu efeito antimicrobiano associado à terapia fotodinâmica no tratamento da pneumonia
TOMÉ, A. J. B.; KASSAB, G.; TOVAR, J. S. D.; JASINEVICIUS, G. O.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.; BUZZÁ, H. H. 74

IC34 - Ação de gemcitabina e paclitaxel transportado por nanocarreadores lipídicos para modulação de células tumorais e imunocompetentes
QUITIBA, J.; ZUCOLOTTO, V. 75

IC35 - Estudo da formação de corona de mucina em nanopartículas de ouro
MENDES, B.; ZUCOLOTTO, V.; MIZIARA, L.; LINS, P. M. P. 76

IC36 - Análise e classificação de plântulas de soja por meio do processamento digital de imagens e de inteligência artificial
SECUNDINO, J. P. A. S.; ODA, Y. S.; CASTRO NETO, J. C. 77

IC37 - Estudos sobre a durabilidade e a estabilidade de biossensores de ouro nanoporoso para aplicação na detecção de dopamina
LARINE, H. M.; GONÇALVES, D.; SUKERI, A. 78

IC38 - Espectroscopia vibracional de modelos de membrana celular através da Geração de Soma de Frequências (Espectroscopia SFG)
FREIRE, B. 80

IC39 - Preparação de nanoestruturas de g-C3N4 de baixo custo: estudo da eficiência fotoquímica através da geração de hidrogênio pela fotossíntese artificial
SANTOS, A. M. S.; GONÇALVES, R. V. 81

IC40 - Implementação e manutenção de código computacional de estrutura eletrônica de semicondutores
PAULI, I. G.; SIPAHI, G. 82

IC41 - O uso do aplicativo Socrative como ferramenta de ensino para aprendizagem móvel
TRANZIL, V. T. R.; BARROS, M. 83

IC42 - Síntese e caracterização de nanopartículas luminescentes para aplicações em sistemas supramoleculares
BRAMBILLA, G. V.; ARAI, M. S.; MERIZIO, L. G.; CAMARGO, A. S. S. 84

IC43 - Triagem de compostos para a identificação de fármacos contra o vírus Chikungunya utilizando sistema replicon subgenômico
POLICASTRO, L. R.; DOLCI, I.; FERNANDES, R. S.; GIL, L. H. V. G.; OLIVA, G. 85

IC44 - Triagem de compostos para a identificação de fármacos contra o vírus Zika utilizando sistema replicon subgenômico
DOLCI, I.; POLICASTRO, L. R.; OLIVA, G.; FERNANDES, R. S. 87

IC45 - Fabricação de acopladores ópticos direcionais via fotopolimerização por absorção de dois fótons
JORGE, G. H. A.; OTUKA, A. J. G.; MENDONÇA, C. R. 89

IC46 - Implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa na IBM Quantum Experience
OLIVEIRA, A. N.; OLIVEIRA, E. V. B.; SANTOS, A. C. 90

IC47 - Desenvolvimento de fotocatalisadores de AgVO3 para degradação de efluentes industriais.
COSTA, V.; NOGUEIRA, I. 91

IC48 - Atividade fotocatalítica de nanopartículas de ZnWO4 decoradas com AgI
COSTA, V.; NOGUEIRA, I. 93

IC49 - Amebas de Vida Livre: elaboração da ferramenta de visualização PVT e identificação de Naegleria spp. e Acanthamoeba spp. no Rio Monjolinho em São Carlos - SP
ISSA, M.; BELLINI, N. K.; CEDRIM, D. 94

IC50 - Estudo vascular de fotocoagulação direta comparado com terapia fotodinâmica usando modelo de vasos sanguíneos de orelha de camundongo
ANDRADE, M. M.; STRINGASCI, M. D. 96

IC51 - Desenvolvimento da heteroestrutura CuWO4/BiVO4/FeCoOx com configuração de bandas otimizada para aplicações na fotossíntese artificial
RABELO, L.; ROSA, W.; GONÇALVES, R. V. 98

IC52 - Aprendizado de técnicas de simulação computacional de semicondutores de baixa dimensionalidade
SALOMON, B.; SIPAHI, G. 100

IC53 - Introduction to particle physics and quantum field theory
JUSTINO, L. R. 101

IC54 - Absorção multifotônica em derivados de perileno
BARBEDO, A.; MENDONÇA, C. R. 102

IC55 - Estudo de partículas coloidais aprisionadas em armadilhas ópticas
GALHASE, G. B.; MUNIZ, S. R. 103

IC56 - Desenvolvimento de algoritmos de reconstrução de fase para microscópio óptico sem lentes
OLIVEIRA, N. P.; D'ALMEIDA, C. P.; PRATAVIEIRA, S. 104

IC57 - Um estudo das teorias de espalhamento eletromagnético no limite mesoscópico
SOUSA, D. B. 105

IC58 - Estudo de formação de coronas de surfactante pulmonar e mucina em nanopartículas de sílica em condições de hiperinflamação
PEDRIZ, I. S.; FERREIRA, L. M. B.; ZUCOLOTTO, V.; ESTEVAO, B. M. 106

IC59 - A cristalografia no dia a dia
MILITAO, L.; ELLENA, J. 108

IC60 - Aprendizagem de máquina em sistemas quânticos
VASCO, B.; MUNIZ, S. R. 109

IC61 - Redes neurais aplicadas ao estudo de dinâmica estocástica
MIRALHAS, V.; MUNIZ, S. R. 110

IC62 - Determinação de espectros de refração não linear de soluções de corantes pelas medidas de rotação não linear da polarização elíptica.
MOYSÉS, R.; MISOGUTI, L. 111

IC63 - Análise de retenção de introns mínimos em câncer de próstata
SANTOS, J. P. C.; ZUVANOV, L.; AMBRÓSIO, A. L. B. 113

IC64 - Integração do framework pymr com o ambiente integrado de desenvolvimento spyder e sua adaptação à projetos de ressonância magnética
CORREIA, D. S.; TANNÚS, A. 114

IC65 - Desenvolvimento de interface gráfica com o usuário para microscópio sem lentes holográfico
CARVALHO, F. A.; PRATAVIEIRA, S.; GARCIA, M. R.; D'ALMEIDA, C. P. 115

IC66 - Desenvolvimento de sistema de iluminação LED RGB para microscópio sem lentes holográfico
KURAMOTO, C. Y.; PRATAVIEIRA, S.; D'ALMEIDA, C. P.; GARCIA, M. R. 116

IC67 - Armadilha bidimensional para gases atômicos degenerados
CHIARELLI, M. 117

IC68 - Desenvolvimento de um sistema ótico de oftalmoscópio adaptado ao smartphone
CASTRO NETO, J. C.; MACHADO, S.; YASUOKA, F. 118

IC69 - Estudos ópticos espectroscópicos em tiofenil-porfirinas: uma possível aplicação em microbiologia.
FRANCA, D.; BONI, L. 119

IC70 - Monitoramento da resposta fotodinâmica empregando um sistema de imagem de campo amplo por fluorescência no infravermelho próximo.
COSTA, G. F.; KURACHI, C.; GARCIA, M. R.; MARTINELLI, L. P. 121

IC71 - Análise e classificação de plântulas de soja por meio do processamento digital de imagens e de inteligência artificial
PIMENTEL, L. P.; CASTRO NETO, J. C. 122

IC72 - Diffusion-weighted magnetic resonance imaging: an approach using Langevin equation
ALVES, F.; PAIVA, F. F.; SOARES PINTO, D. O. 123

IC73 - Estudos ópticos espectroscópicos lineares e não lineares em uma nova classe de porfirinas
NASCIMENTO, C. S.; BONI, L. 124

IC74 - Desenvolvimento de técnica de mosaico para produção de imagens de retinografia
MACHADO, S.; CASTRO NETO, J. C. 126

IC75 - Modelo de irradiação e avaliação de degradação para descontaminação de líquidos de preservação de órgãos para transplante por inativação fotodinâmica
SANTOS, S. M. B.; BAGNATO, V. S.; VOLLET FILHO, J. D.; KURACHI, C. 127

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Rotating BEC in a ring trap
TOMISHIYO, G.; SANTARELLI, M. C. 128

PG2 - Estudo da complexidade emergente de modelos topológico-dinâmicos
DOMINGUES, G. S.; COSTA, L. F. 129

PG3 - The deluge of spurious information in causal network inference
MARTINELLI, T.; SOARES PINTO, D. O.; RODRIGUES, F. A. 130

PG4 - Non-asymptotic Coqblin-Schrieffer interaction between local f^1-states
PICOLI, F. D.; LÍBERO, V. L. 131

PG5 - Subradiance with saturated atoms: population enhancement of the long-lived states
MOREIRA, N. A.; CIPRIS, A.; SANTO, T. S. E.; WEISS, P.; VILLAS-BOAS, C. J.; KAISER, R.; GUERIN, W.; BACHELARD, R. 132

PG6 - Elementos genéticos móveis envolvidos na transferência do gene blaKPC em bactérias gram-negativas de origem clínica
BORALLI, C. M. S.; CAMARGO, I. L. B. C.; SILVA, G. V.; HUANAMBAL, P.; RIOS, A. L. V. 133

PG7 - Chiral spin liquids in the Kagome lattice
SOBRAL, J. A. S.; OLIVIERO, F. G.; PEREIRA, R. G.; ANDRADE, E. C. 135

PG8 - Identificação de minérios de ferro
QUEIROZ, A. E.; ANDRADE, M. B. 136

PG9 - Descrição e caracterização cristaloquímica de minerais brasileiros, com ênfase em minerais do Estado do Amapá-AP
LOPES, G. A. C.; ANDRADE, M. B.; ATENCIO, D. 137

PG10 - Imidazopyridines derivatives: an evidence of excited state absorption contributing to the two-photon absorption
PELOSI, A.; BONI, L.; MENDONÇA, C. R.; COCCA, L. Z.; ABEGAO, L.; SCIUTI, L.; PIGUEL, S. 139

PG11 - Transparência eletromagneticamente induzida em átomos de Rydberg com quatro níveis usando modos Laguerre-Gauss
GOMES, N. D.; MARCASSA, L. G. 140

PG12 - Construção de sistema de translação óptica de átomos frios com uso de sistema de lentes de zoom opticamente compensadas.
MARTINEZ, V. J.; AGOSTINHO, E. T. 141

PG13 - Imidazo[4,5-b]- pyridines derivatives as high emissive dyes for nucleic acids spectroscopic studies
COCCA, L. Z.; PELOSI, A.; SCIUTI, L.; PIGUEL, S.; BONI, L. 143

PG14 - Phenomenological modeling of the first hyperpolarizability of organic molecules applied in chalcone molecules
SCIUTI, L.; BONI, L.; COCCA, L. Z.; ABEGAO, L.; PELOSI, A.; COSTA, R.; MISOGUTI, L.; LIMBERGER, J.; MENDONÇA, C. R. 144

PG15 - Construção de base de dados de compostos químicos para o desenvolvimento de modelos baseados em aprendizado de máquina aplicados à descoberta de candidatos a fármacos para a malária
NOGUEIRA, V. H. R.; GUIDO, R. V. C.; FASSIO, A. 146

PG16 - Otimização da terapia fotodinâmica para tratamento do melanoma cutâneo, analisando tipos de fotossensibilizadores e associação com agentes clareadores ópticos
MARTINELLI, L. P.; KURACHI, C.; MORIYAMA, L. T.; DIAS, L. D. 147

PG17 - Studies of stochastic thermodynamics with optical weezers
KAMIZAKI, L. P.; MARTINS, T. T.; MUNIZ, S. R. 148

PG18 - Determinação da composição, estrutura e morfologia de Indicadores Biológicos Fixos e sua correlação com variações ambientais
FERREIRA, P. R.; ALMEIDA, J. M. P.; TAVARES, M. D. S.; HERNANDES, A. C. 149

PG19 - Cold Rydberg atoms in the microwave cavity
REGUERA, C. R. M.; MARCASSA, L. G. 151

PG20 - The closest vector in a lattice problem for quantum complexity
MORAZOTTI, N. A.; NAPOLITANO, R. J. 152

PG21 - Produção de oligossacarídeos a partir de pré-tratamentos verdes em resíduos agroindustriais e aplicação enzimática
CAPETTI, C.; POLIKARPOV, I.; ARNOLDI, V.; DABUL, N. 153

PG22 - Propagadores em uma teoria de campos SU(3) na rede
LEAL JUNIOR, J. M.; MENDES, T. C. R. 155

PG23 - Espectroscopia ultrarrápida: excitação e prova degenerados e não degenerados resolvidos em polarização
GARCIA, R.; BONI, L. 156

PG24 - Construction of an optical cavity for experiments with Rydberg atoms
RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ, D.; MARCASSA, L. G. 157

PG25 - Descoberta de padrões em geradores de números pseudo-randômicos
BISPO JUNIOR, A. G.; BRUNO, O. M. 158

PG26 - Correlações magnéticas e a transição de Mott desordenada
ALMEIDA, I. C.; ANDRADE, E. C. 159

PG27 - Viabilidade da descontaminação de órgãos (rins) para transplante utilizando técnicas fotônicas microbicidas
GOENAGA, L.; VOLLET FILHO, J. D.; INADA, N. M.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S. 160

PG28 - Avaliação de curcuminóides naturais versus sintéticos como fotossensibilizadores em terapia fotodinâmica antimicrobiana
MELO, N.; SOARES, J. C.; DIAS, L.; INADA, N. M. 162

PG29 - Influência das características de conectividade na execução distribuída de tarefas em redes complexas
PASTORE, A. M.; TRAVIESO, G. 163

PG30 - Stochastic simulation of narrow-line magneto-optical traps
SANTOS, B. N.; HENN, E. 164

PG31 - Avaliação in vitro da interação entre septinas e a toxina botulínica
MAMANI, E. C.; ARAÚJO, A. P. U. 165

PG32 - Deterministic tourist walk, an algorithm for texture analysis and classification.
MERENDA, J. V.; BRUNO, O. M. 166

PG33 - Remoções consecutivas de arestas de redes complexas e seus efeitos na correlação entre grau e ativação por caminhadas aleatórias
FURUTA, R. H. M.; COSTA, L. F. 167

PG34 - Mecanismos quânticos da fotoprodução energética em mitocôndrias
MEZZACAPPO, N. F.; VOLLET FILHO, J. D.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S. 168

PG35 - Descoberta de inibidores a partir de plantas do cerrado brasileiro como candidatos a compostos líderes para a malária
MOURA, I.; SOUZA, G.; SOUZA, L.; AGUIAR, A. C. C.; GUIDO, R. V. C. 169

PG36 - A false vacuum Skyrme model for nuclear matter
LIVRAMENTO, L. R.; FERREIRA, L. A. 170

PG37 - Mecanismos de propagação do ultrassom no tecido biológico para sua aplicação na terapia sono-fotodinâmica
ANTUNES, C. A.; PRATAVIEIRA, S. 171

PG38 - Modulated optical tweezers as a dynamical tool for stochastic thermodynamics
MARTINS, T. T.; KAMIZAKI, L. P.; MUNIZ, S. R. 173

PG39 - Otimização e elucidação da atividade antibacteriana de peptídeos catiônicos em patógenos multirresistentes
RIGHETTO, G. M.; LOPES, J. L. S.; SANTOS FILHO, N. A.; BELTRAMINI, L. M.; CILLI, E. M.; CAMARGO, I. L. B. C. 174

PG40 - FlowMR: um protótipo baseado no modelo a fluxo de dados dinâmico, escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo
SILVA JUNIOR, J. T.; MATIAS, P.; RUGGIERO, C. A. 176

PG41 - Modeling the effects of social distancing on the large-scale spreading of diseases
VENTURA, P. C.; ALETA, A.; RODRIGUES, F. A.; MORENO, Y. 178

PG42 - Perturbing the Kitaev spin liquid with disorder
MEIRELES, V. D.; ANDRADE, E. C. 179

PG43 - Macrófagos associados à leucemia promielocítica aguda como transportadores de nanoterapêuticos à células leucêmicas via interação de receptores CD44 e ácido hialurônico
ANTONIO, L.; ZUCOLOTTO, V.; RIBOVSKI, L. 180

PG44 - Estrutura molecular que incorpora scaffolds de quinazolina e chalcona para o desenvolvimento de híbridos anticâncer
SOUZA, M. S.; RUSSOWSKY, D.; ANDRICOPULO, A. D. 181

PG45 - Combinação de antibiótico com inativação fotodinâmica para o tratamento de infecções bacterianas
SOARES, J. M.; BAGNATO, V. S.; BLANCO, K. 183

PG46 - Anisotropias magneticamente induzidas na direção de chegada de UHECR de radiogaláxias próximas
OLIVEIRA, C.; SOUZA, V. 184

PG47 - Estudo teórico e experimental da desaceleração de um feixe supersônico de Rb2.
TORRES, M. L.; MARCASSA, L. G.; CARDOSO, M. 185

PG48 - Estrutura molecular que incorpora scaffolds de quinazolina e chalcona para o desenvolvimento de híbridos anticâncer
SOUZA, M. S.; MASS, E. B.; RUSSOWSKY, D.; ANDRICOPULO, A. D. 186

PG49 - Desenvolvimento do método de espectroscopia por volume único Stimulated Echo Acquisition Mode (STEAM) compatível com o espectrômetro digital do CIER-Mag
MARCOLAN, J.; TANNÚS, A. 188

PG50 - Análise das interações entre septinas envolvidas no core de octâmeros e hexâmeros.
SIQUEIRA NETO, N. S.; ARAÚJO, A. P. U. 190

PG51 - Dinâmica de fluidos computacional através de imagens por ressonância magnética: processamento de imagens e reconstrução tridimensional
SOLCIA, G.; FOERSTER, B. U.; ANDREETA, M.; BONAGAMBA, T. J.; PAIVA, F. F. 191

PG52 - Diversidade de opiniões e bolha sociais no modelo de Sznajd adaptado
BENATTI, A. 193

PG53 - Avaliação do efeito da terapia fotodinâmica em osteorradionecrose induzida em modelo animal
MARQUES, M. J. A. M.; KURACHI, C. 194

PG54 - Implementação de um sistema sintonizável para o estudo da dependência espectral da primeira hiperpolarizabilidade molecular
SANTOS, C. H.; BONI, L. 195

PG55 - A dependência temporal da descoerência de um qubit por ruído de fase: cálculos analíticos das soluções exata e da equação mestra
MOTTA, O.; NAPOLITANO, R. J. 196

PG56 - Abordagem NRG para o cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica.
DINIZ, G.; OLIVEIRA, L. N. 197

PG57 - Terapia fotodinâmica antimicrobiana no tratamento da pneumonia
KASSAB, G.; BAGNATO, V. S.; TOVAR, J. S. D.; BRAZACA, L.; FEITOR, J. F.; REIS, F. P.; GOMES, S.; BUZZÁ, H. H.; INADA, N. M.; FERNANDES, P. M. P.; CARDOSO, D. R.; CARRILHO, E.; KURACHI, C. 199

PG58 - Energetics of autonomous quantum systems
MALAVAZI, A. H. A.; BRITO, F. B. 201

PG59 - Passeio quântico de elefante
NAVES, C. B.; SOARES PINTO, D. O. 202

PG60 - Descoberta de derivados de marinoquinolina como inibidores de Plasmodium falciparum
SOUZA, G.; AGUIAR, A. C. C.; GUIDO, R. V. C.; BARBOSA, C. S. 203

PG61 - Estudos biofísicos e estruturais das septinas de Drosophila melanogaster
FERNANDES, A.; NASCIMENTO, A. S.; GARRATT, R. 204

PG62 - Sondando matéria escura no sistema solar através de raios gama
FAGIANI, J.; SIQUEIRA, C.; SOUZA, V. 205

PG63 - Caracterização estrutural e funcional de três enzimas com potencial uso biotecnológico da rota biossintética D-manose / L-galactose do ácido L-ascórbico de Myrciaria dubia "camu-camu"
SANTILLAN, J. A. V.; CABREJOS, D. A. L.; GARRATT, R. 206

PG64 - Invariância conforme no modelo XY
RAMOS, L.; ALCARAZ, F. C. 207

PG65 - Isometria acompanhante e conexões no espaço de estados puros
MAGNO, G. F.; GROSSI, C. H.; SOARES PINTO, D. O. 208

PG66 - Potenciais eletromagnéticos sintéticos e as propriedades espinoriais dos condensados de Bose-Einstein
DONATO, M. H. F.; MUNIZ, S. R. 209

PG67 - Sensing properties of In2O3-SnO2 and rGO/In2O3-SnO2 towards ozone gas
ENSUNCHO, L.; MASTELARO, V. R. 210

PG68 - Ativação da LPMO do organismo Myceliophthora thermophila utilizando fotossensibilizadores e avaliação da sua atividade oxigenase e peroxigenase na presença de diferentes agentes redutores
VACILOTTO, M. M.; POLIKARPOV, I.; PELLEGRINI, V. O. A.; SEPULCHRO, A. G. V. 211

PG69 - Quantificando recursos para o mecanismo de Page-Wootters: assimetria compartilhada como entropia relativa de emaranhamento
CARMO, R. S.; SOARES PINTO, D. O. 212

PG70 - An information geometric approach to holography
FIUSA, G.; SOARES PINTO, D. O. 213

PG71 - Direct DNA damage simulations of Solar Wind's protons using the Geant4-DNA Monte Carlo simulation toolkit in D. radiodurans and E. coli
AGUERA, J. J. M.; GALANTE, D. 214

PG72 - Dinâmica de um estado acoplado com o banho
GOETTEMS, E. I.; SOARES PINTO, D. O.; VALENTE, D. M.; AFONSO, R. 215

PG73 - Implementation and simulation of drift-diffusion models for organic mixed conductor devices
UNIGARRO, A. D. P.; GÜNTHER, F.; FARIA, G. 216

PG74 - Enterococcus faecalis: cristalografia e cinética enzimática de proteínas associadas à formação de biofilme
CLEMENTINO, L.; NASCIMENTO, A. S. 217

PG75 - Desenvolvimento de um sistema com arquitetura em nuvem para a detecção de ceratocone subclínico por meio de deep learning, utilizando polinômios de Zernike e imagens de topografia e de paquimetria de córnea
OLIVEIRA, L. O.; CASTRO NETO, J. C.; SIQUEIRA, W. C. A.; OLIVEIRA, A. O.; TAGUCHI, F. . 218

PG76 - Desenvolvimento de um sistema inteligente aplicado à Agricultura de Precisão para classificação de plantas de soja e ervas daninhas em tempo real utilizando imagens multiespectrais
ODA, Y. S.; CASTRO NETO, J. C. 219

PG77 - Fabricação de microambienetes 3D para o desenvolvimento de microorganismos
MORAES, J. Q. R.; MENDONÇA, C. R.; OTUKA, A. J. G. 221

PG78 - Simulation of a nanoplasmonic wave plate based on elliptical bull's eye nanostructure
CALDERÓN, G. L.; RIVERA, V. A. G.; MAREGA JUNIOR, E. 222

PG79 - Teoria de grupos aplicada ao método k.p: Hamiltoniano Wurtzita 8x8
OLIVEIRA, C. E.; SIPAHI, G. 223

PG80 - Produção, caracterização e aplicação de diferentes classes de enzimas com potenciais biotecnológicos e biomédicos
CORTEZ, A.; POLIKARPOV, I.; ARNOLDI, V.; SOUSA, A. N. G. D. D. 224

PG81 - Comunicação, comunidade e informação: um estudo da gênese da teoria da informação
PENA, A. B.; SILVA, C. C. 226

PG82 - Purificação quântica através de um estado quádruplo para incluir ruído ambiental e aparato de medida na investigação do conceito de complexidade quântica
AUDI, G.; NAPOLITANO, R. J. 227

PG83 - Revelando detalhes estruturais de complexos de septinas humanas por Crio-ME
MENDONÇA, D. C.; PORTUGAL, R. V.; GARRATT, R. 228

PG84 - Verificação da taxa do trabalho quântico em um sistema simples
SILVA, L. A. J.; BRITO, F. B. 230

PG85 - Automatização da otimização da técnica de contraste de fase para o desenho de potenciais ópticos em tempo real
RAMPIM, A.; MUNIZ, S. R. 231

PG86 - Fabricação de dispositivos fotônicos em SiC com pulsos de femtossegundos
CURVELO, K.; MENDONÇA, C. R. 232

PG87 - Interação de plasmons-polaritons de superfície com pontos quânticos semicondutores
LEMES, M. F. S.; MAREGA JUNIOR, E. 233

PG88 - Condensado de Bose-Einstein dipolar numa armadilha bolha
DINIZ, P.; HENN, E. 234

PG89 - Photon-mitochondria interaction and the effects on quantum regimes
PEREZ, A. S.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M.; MEZZACAPPO, N. F.; VERCESI, A. E.; CASTILHO, R. F. 235

PG90 - Diagnóstico precoce e não invasivo de tumor usando nanossensores de atividade proteolítica
SILVA, E.; ZUCOLOTTO, V. 236

PG91 - Produção recombinante e caracterização bioquímica de uma celobiose desidrogenasa (CDH) de Thermothelomyces thermophilus M77
SAMANIEGO, L. V. B.; ARNOLDI, V.; POLIKARPOV, I. 237

PG92 - Ativação de LPMO em sistema com aril-álcool oxidase
HIGASI, P. M. R.; POLIKARPOV, I. 239

PG93 - Coherent light-matter interaction in dense atomic clouds
FERNANDEZ, M. F.; MAGNANI, P. H. N.; DIAS, P. G. S.; TEIXEIRA, R. C.; COURTEILLE, P. W. 240

PG94 - Real-space formulation of the numerical renormalization-group method (NRG)
FERRARI, A. L.; OLIVEIRA, L. N. 241

PG95 - Descoberta de novos derivados benzoimidazólicos como candidatos a compostos líderes para a Malária
BARBOSA, C. S.; GUIDO, R. V. C.; AGUIAR, A. C. C.; CRUZ, M. D.; DIAS, L. C. 242

PG96 - Universal time evolution of a turbulent superfluid Bose gas
OROZCO, A. D. G.; MADEIRA, L.; MORENO, M.; FRITSCH, A.; TAVARES, P. E.; CASTILHO, P. C. M.; CIDRIM, A.; ROATI, G.; BAGNATO, V. S. 244

PG97 - Determinação precisa do acoplamento forte
RODRIGUES, M. V.; BOITO, D. 245

PG98 - Structure and functioning of neural networks: the complex network properties of artificial neurons
SCABINI, L.; BRUNO, O. M. 246

PG99 - Lipopeptídeo produzido por uma linhagem termohalofílica de Bacillus alveayuensis isolada de rocha reservatório de petróleo: avaliação da atividade antimicrobiana e da capacidade de recuperação de óleo em meio poroso
ARGENTIN, M. N.; BOSSOLAN, N. R. S. 248

PG100 - Redundant information storage and non-Markovianity in the central spin model
MARTINS, W.; SOARES PINTO, D. O. 250

PG101 - Toward lossless infrared optical trapping of small nanoparticles using nonradiative anapole modes
SARRIA, J. J. H.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; SALAZAR, J. R. M. 251

PG102 - Resolvendo charadas cripto-aritméticas com algoritmos bio e sócio-inspirados
REIS, L. A.; FONTANARI, J. F. 252

PG103 - Estratégias em quimioinformática para uma série de compostos antichagásicos
MEDEIROS, A. R.; FERREIRA, L. L. G.; ANDRICOPULO, A. D. 253

PG104 - Descoberta de compostos novos híbridos de Marinoquinolina com derivados de Artemisinina como inibidores de Plasmodium falciparum
ZANINI, C.; CAPITÃO, R. M.; SANTO, R. D. E.; CORREIA, C. R. D.; AGUIAR, A. C. C.; GUIDO, R. V. C. 255

PG105 - Reconstrução do X_{max} de chuveiros atmosféricos usando telescópios Cherenkov
GILER, A. G. D.; SOUZA, V. 257

PG106 - Investigações de condensados de Bose-Einstein fora do equilíbrio
ARMIJOS, M. A. M.; BAGNATO, V. S.; OROZCO, A. D. G.; CASTILHO, P. C. M.; TELLES, G.; HENN, E. 258

PG107 - Crosslinking agent's influence on the ionic and electronic conductivity of PEDOT:PSS for application in bioelectronics: is the literature doing the best choice?
SOUZA, R. F. S.; FARIA, G. 260

PG108 - Evolução dirigida com linezolida e tedizolida da Staphylococcus aureus SA43, representante da linhagem ST5-SCC mec II, e comparação fenotípica de isolados derivados
ZENATTI, L.; SOUSA, A. N. G. D. D.; SILVA, G. V.; CAMARGO, I. L. B. C. 261

PG109 - Aumento da emissão de fluorescência da molécula de perileno através da formação de nano-partículas orgânicas e sua potencial aplicação como marcador biológico
GALINDO, D. M.; AKIYAMA, J.; COCCA, L. Z.; BONI, L. 263

PG110 - Caracterização óptica e bioquímica da melanina e seu efeito na resposta da terapia fotodinâmica: modelo em células de melanoma pigmentado
SOUZA, G.; GUIMARÃES, F. E. G.; KURACHI, C. 265

PG111 - Localização de Anderson em cristais fotônicos naturais
MATTOS, V. S.; BARRERA-PATIÑO, C. P.; BAGNATO, V. S.; CASTRO NETO, J. C. 266

PG112 - Caracterização e modelagem da topologia de vasos sanguíneos do córtex de camundongos
BORSATO, V. E. K.; COMIN, C. H. 267

PG113 - Platinum micromachining using femtosecond laser pulses
ROCHA, L. E. R.; PAULA, K. T.; MENDONÇA, C. R. 268

PG114 - Estudo da glicosiltransferase LafB de Enterococcus faecium envolvida na hipersensibilidade à daptomicina
ESQUÉN, P. H.; MUNIZ, J. R. C.; CAMARGO, I. L. B. C. 269

PG115 - Investigação da resposta imunológica in vitro em câncer de pele melanoma após combinação de radioterapia e terapia fotodinâmica
LOPES, R. G.; INADA, N. M.; MEDEIROS, A. I.; FARIA, C. 271

PG116 - Dielectric profile of a Langmuir hydrated membrane model by molecular dynamics simulation
ZAPATA, J. C. B.; MOURA, A. F.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 272

PG117 - Diagnóstico point-of-care do tumor hepático usando dispositivo microfluídico de papel
RIBEIRO, L. V.; ZUCOLOTTO, V. 273

PG118 - Ameaça das fake news à segurança epistêmica
TÓRTURA, H. A.; FONTANARI, J. F. 274

PG119 - Influência da interface contato elétrico/pata termoelétrica no rendimento de geradores termoelétricos não planares
BOCCHI, J. H. C.; PEREIRA, G. G. D.; FARIA, G. 275

PG120 - Reposicionamento farmacêutico através do desenvolvimento de cocristais droga-droga para o tratamento de Covid-19
NUNES, P.; ELLENA, J. 276

PG121 - Caracterização e uso de nanoemulsões de indocianina verde para o tratamento de doenças por terapias envolvendo a luz
JASINEVICIUS, G. O.; TOVAR, J. S. D.; KASSAB, G.; TOMÉ, A. J. B.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.; BUZZÁ, H. H. 278

PG122 - Can quantum correlations be verified as physical resources in quantum processes?
NEVES, L. R. T.; BRITO, F. B. 280

PG123 - Sistemas termodinâmicos fora do equilíbrio e a igualdade de Jarzynski
DRINKO, A.; SOARES PINTO, D. O. 281

PG124 - Cargas aceleradas e o princípio da equivalência
WESTIN, R.; VANZELLA, D. A. T. 282

PG125 - Ensaio de MTT múltiplo na análise de morte reprodutiva por fotobiomodulação combinada à radioterapia em células endoteliais
COSTA, C.; FARIA, C.; BAGNATO, V. S. 283

PG126 - Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicos
BARBOSA, M. G.; VANZELLA, D. A. T. 285

PG127 - Improving the description of hadronic tau decays
OLIANI, F.; BOITO, D. 286

PG128 - Dissociação fotocatalítica da água utilizando luz solar simulada para produção de H2 combustível a partir da heterojunção SrTiO3/Fe2TiO5
CENTURION, H. A.; GONÇALVES, R. V. 287

PG129 - Primary particle type reconstruction using Cherenkov telescopes
PAULA, T.; SOUZA, V. 288

PG130 - Aplicação de eletrofisiologia não-invasiva e instrumentação eletrônica dedicada na caracterização da sensibilidade visual de Gymnotus carapo
BELLINI, B. S.; PINTO, R. D.; ALMEIDA, L. B. 289

PG131 - Redução de energia em módulos excitados não-abelianos em cordas cósmicas
GREGÓRIO, G. M.; HARTMANN, B. 290

PG132 - Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas
LUCHESI, A. C. F.; BRUNO, O. M. 291

PG133 - Estudos funcionais e estruturais de proteínas envolvidas na biossíntese de tiamina em Enterococcus faecalis
GUTIERREZ, R. F.; WRENGER, C.; NASCIMENTO, A. S. 292

PG134 - Um ensaio de modelagem por homologia para a estrutura RmlA de Streptococcus pneumoniae SP19-BS75
OLIVEIRA, L. F. M.; NASCIMENTO, A. S. 294

PG135 - Otimização da terapia fotodinâmica mediante a associação da terapia sonodinâmica para o tratamento do melanoma cutâneo em modelo animal
AYALA, E. T. P.; PRATAVIEIRA, S.; ALVES, F. 295

PG136 - Levantamento estatístico e os desafios de alunos com necessidades educativas especiais no Ensino Superior
MASSON, R.; MUNIZ, S. R. 296

PG137 - Relações de Incertezas generalizadas entre variáveis termodinâmicas no regime quântico
AFONSO, R.; PINTO, D. S. 298

PG138 - Interaction mechanisms between Cytochrome P450 3A4 and membrane models associated with drug resistance
SANTOS, K. F.; VASQUES, E. M.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 299

PG139 - Estudo da relaxação de sistemas quadrupolares via Ressonância Magnética Nuclear
LEAL, A. C. S.; BONAGAMBA, T. J. 300

PG140 - Estudo da funcionalização de materiais poliméricos para inativação fotodinâmica de biofilmes bacterianos
ZANGIROLAMI, A.; BLANCO, K. 301

PG141 - Energia de vácuo na cosmologia moderna: modelos clássicos, vácuo adiabático e renormalização adiabática
OLIVEIRA, E. A. B. 303

PG142 - Efeitos de strain em nanofios politípicos
SIPAHI, G.; SIQUEIRA, A. 305

PG143 - Descoberta de inibidores das proteases de SARS-CoV-2: estudos estruturais e planejamento de candidatos a fa´rmacos antivirais
GODOY, M. O.; GODOY, A.; NOSKE, G. D.; FREIRE, M. C. L. C.; NAKAMURA, A.; OLIVA, G.; GUIDO, R. V. C. 306

PG144 - Preprocessing and exploratory analysis of Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) data for diagnosis with immunoassays
BRAZ, D. C.; REDIN, G. G. I.; GONÇALVES, D.; BROLO, A. G.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 307

PG145 - Caracterização da superfície da calcita através de espectroscopia vibracional não-linear
PALMA, N. B.; MIRANDA, P. B. 308

PG146 - Bose-Einstein condensates and the thin-shell limit in bubble traps
BIRAL, E. J.; BAGNATO, V. S.; SANTOS, F. E. A.; MÓLLER, N. 310

PG147 - Characterizing complexity of complex networks based on topological heterogeneity
CUNHA, É. F.; COSTA, L. F. 312

PG148 - Investigação das propriedades eletrônicas e estruturais de fotoanodos de Vanadato de Bismuto preparados por spin coating
CORREA, A. S.; GONÇALVES, R. V. 313

PG149 - Avaliação dos parâmetros ótimos na inativação fotodinâmica de pneumonia simulando condições humanas.
TOVAR, J. S. D.; KASSAB, G.; BUZZÁ, H. H.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S. 315

PG150 - Study of the mechanism of viral entry inhibitors and SARS-CoV-2 pseudovirus neutralization assay in the BSL2 laboratory
PINTO, F.; SADRAEIAN, M.; GUIMARÃES, F. E. G. 316

PG151 - Mapeamento do campo elétrico em transistores poliméricos por microscopia SFG
SOUSA, M. S.; MIRANDA, P. B. 317

PG152 - Análise de chuveiros atmosféricos extensos por meio de simulações
SANT'ANNA JUNIOR, A. B.; SOUZA FILHO, L. V.; MAIA, L. P. 318

PG153 - Generating arbitrary laser beam shapes through phase-mapped designed beam splitting
SILVA, P. F.; MUNIZ, S. R. 320

PG154 - Associação entre poluição do ar e COVID-19: um estudo envolvendo microscopia confocal e eletrônica
VICENTE, M. L. F.; GUIMARÃES, F. E. G.; SANTOS, N. V.; VERAS, M. M.; SALDIVA, P. H. N.; PRATAVIEIRA, S. 321

PG155 - Interaction of two fully water-soluble chitosans with bacterial membrane models using Langmuir monolayers
JOCHELAVICIUS, K.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 323

PG156 - Avaliação da radiação ultravioleta C e terapia fotodinâmica na descontaminação de órgãos para transplante em modelos in vitro
GAMEZ, Y. M.; VOLLET FILHO, J. D.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. 324

PG157 - Superconducting Xmon quantum battery
SANTOS, A. C.; SOUZA, P. J. P.; VILLAS-BOAS, C. J.; HU, C.; YU, D. 325

PG158 - Estudo da relação entre retenção de íntrons mínimos e câncer
ZUVANOV, L.; MARCO, R.; AMBRÓSIO, A. L. B. 326

PG159 - Correlações quânticas em sistemas tipo-Dirac localizados
SILVA, C. F.; BERNARDINI, A. E. 328

PG160 - Cornering Majoranas
PUPIM, L.; EGUES, J. C. 329

PG161 - Correlações gluônicas na rede a temperatura finita
CERQUEIRA, M. C.; MENDES, T. C. R. 330

PG162 - Informação Quântica e a Gravidade Emergente
BORIN, D.; VANZELLA, D. A. T. 331

PG163 - Optimization of quantum adiabatic evolution through deep reinforcement learning strategies
SANTOS, V. C.; VILLAS-BOAS, C. J.; SANTOS, A. C. 332

PG164 - Geração não local de um estado emaranhado entre qbits supercondutores via dinâmica efetiva
OLIVEIRA, E. V. B.; SANTOS, A. C.; VILLAS-BOAS, C. J. 333

PG165 - Fenômenos de transporte de uma única molécula através de um nanoporo
ZAGO, L. A.; GUIMARÃES, F. E. G. 335

PG166 - Transistor quântico em sistema de qubits supercondutores
VELOSO, B. A.; SANTOS, A. C. 336

PG167 - Alfabetização científica e a natureza da ciência: elaboração de uma sequência didática sobre a física envolvida na pandemia de COVID-19
SARAIVA, E. R.; SILVAI, C. C. 337

PG168 - Estudo da região do Centro Galáctico e busca de sinal de matéria escura com raios gamma
REIS, I. 339

PG169 - Desenvolvimento de um microscópio sem lentes holográfico para monitoramento de culturas celulares
D'ALMEIDA, C. P.; PRATAVIEIRA, S.; OLIVEIRA, N. P.; CARVALHO, F. A.; KURAMOTO, C. Y.; KASSAB, G. 341

PG170 - Avaliação da atividade inibitória de Peptídeos diméricos não tóxicos derivados de Bothropstoxin-I na atividade da protease PLpro do vírus SARS-CoV-2
FREIRE, M. C. L. C.; OLIVA, G.; NOSKE, G. D.; OLIVEIRA, V. G. F.; SOUZA, E. P.; NOGUEIRA, V. H. R.; GODOY, M. O.; GODOY, A.; FERNANDES, R. S.; CILLI, E. M.; GUIDO, R. V. C. 343

PG171 - Seleção de bactérias isoladas de um reservatório de petróleo brasileiro para a produção de biossurfactante: análise da estabilidade de biossurfactante produzido pela linhagem Ar35D5 sob diferentes condições de temperatura, pH e salinidade.
FERREIRA, J. F.; BOSSOLAN, N. R. S. 345

PG172 - Avaliação do tratamento combinado da terapia fotodinâmica e ação enzimática na inativação de biofilmes bacterianos
NAKADA, P. J. T.; ALVES, F.; POLIKARPOV, I.; KURACHI, C. 347

PG173 - Interação quark-antiquark em ordens altas e a massa do quark top
LONDON, C. Y. M.; BOITO, D. 349

PG174 - Bases estruturais do mecanismo de maturação da enzima Main Protease (Mpro) do vírus SARS-CoV-2
NOSKE, G. D.; GODOY, A.; OLIVA, G.; NAKAMURA, A.; OLIVEIRA, V. G. F.; FERNANDES, R. S.; LIMA, G.; ROSA, H. V. D.; PEREIRA, H.; ZERI, A. C. M.; NASCIMENTO, A. S.; FREIRE, M. C. L. C. 350

PG175 - Soluções compactas para gravidade escalar-tensorial
CONSOLE, F.; HARTMANN, B. 352

PG176 - Correlação condicional passado-futuro de um reservatório de defasagem não-Markovianos controlado
RODRIGUES, N. E. 353

PG177 - Modelo de infecção bacteriana em Membrana Corioalantóica para avaliação da Inativação Fotodinâmica em tempo real
FERREIRA, G. C.; BUZZÁ, H. H.; KURACHI, C.; INADA, N. M.; TOMÉ, A. J. B.; BAGNATO, V. S. 354

PG178 - The crystal structure of Bl_Ylmd a putative multifunctional purine nucleoside enzyme YfiH-like from Bacillus licheniformis
ALMEIDA, L. R.; ROSA, H. V. D.; GREJO, M.; SANTOS, J.; BERNARDES, A.; MUNIZ, J. R. C. 355

PG179 - Modelos de docking e dinâmica molecular para a determinação do enantiômero ativo na inibição da polimerização de tubulina
SALCEDO, D. L. P.; ANDRICOPULO, A. D. 357

PG180 - Fitting das estruturas de bandas a partir de estratégias que envolvem propriedades de simetrias dos materiais baseadas na teoria de grupos
WANDERLEY, A. B.; SILVA, J. L. F.; SIPAHI, G. 358

PG181 - Sistemas estáticos, estacionários e dependentes do tempo no Anti-de-Sitter e sua interpretação holográfica
RAMPONI, T. C. 360

PG182 - Dinâmica de vórtice no toróide BEC
BERETA, S. 361

PG183 - Análise multi-resolução inteligente: combinando a transformada wavelet com estratégias de deep learning para redução de ruídos em sinais e imagens de ressonância magnética
QUEIROZ, G. E. T.; PAIVA, F. F.; GUIDO, R. C. 362

PG184 - Production of fermentable sugars and nanolignins via liquid hot water and sulfonated pretreatment combinations aiming at the optimal enzymatic conversion of sugarcane bagasse.
KANE, A. O.; POLIKARPOV, I.; ARNOLDI, V. 364

PG185 - Septins and flaviviral proteases: a structural analysis
ROSA, H. V. D.; MENDONÇA, D. C.; LEONARDO, D.; BROGNARA, G.; BRANDAO NETO, J.; PEREIRA, H.; ARAÚJO, A. P. U.; GARRATT, R. 365

PG186 - Efeitos de oscilações sequenciais em superfluidos atômicos
BARROS, L. W. T.; BAGNATO, V. S. 366

PG187 - Edge-state related phenomena at topological-insulator/ferromagnet interfaces
ARAUJO, R. N.; EGUES, J. C. 367

PG188 - Representação e caracterização de circuitos amplificadores através de grafos
MIRANDA, W. M.; COSTA, L. F. 368

PG189 - Simulação de metasuperfícies fabricadas via transferência direta a laser
COUTO, F. 369

PG190 - Efeitos da acidificação dos oceanos sobre a toxicidade das nanoparticulas de óxido de Cério e Zinco (CeO2 - ZnO) na microalga marinha Navicula sp.
MONTERO, M. A.; ZUCOLOTTO, V. 371

PG191 - Bloch oscillations of ultra-cold strontium atoms continuously monitored with a ring cavity
RIVERO, D. 373

PG192 - Spontaneous scalarization of self-gravitating magnetic fields.
CAPOBIANCO, R. A.; HARTMANN, B.; BRIHAYE, Y. 374

PG193 - Modelagem por homologia de dois diferentes dímeros de septinas de levedura
SILVA, R. M.; GARRATT, R. 375

PG194 - Caracterização de jamming avoidance response em gymotiformes e modelo de deflexão de seu campo elétrico em coespecíficos
CESARINO, V.; PINTO, R. D. 376

PG195 - Investigação estrutural e bioquímica das enzimas da via de biossíntese da vitamina B6 em Staphylococcus aureus
BARRA, A. L. C.; NASCIMENTO, A. S. 377

PG196 - The Tb→Eu energy transfer process in tungsten-phosphate glasses
FARIA, W.; CAMARGO, A. S. S. 379

PG197 - Automação de um frontend de RMN para controle de periféricos de baixa velocidade
MONTES, R. S. 380

PG198 - Structural origins of Weathering stability in Sodium Aluminum Phosphosilicate glasses: results from multinuclear solidstate NMR
ECKERT, H.; SANTOS, M. L.; YAMAZAKI, H.; NAKANE, S.; IKEDA, H. 381

PG199 - Study of mixed ions effect in Li-Cs-Sr metaphosphate glasses by solid state NMR and impedance spectroscopy
MORGUETO, G. F.; SCHNEIDER, J. F.; RODRIGUES, A. C. 382

PG200 - A high throughput, inexpensive and open-source biorreactor for optimization of recombinant protein expression
FONTOLAN, L. S. B.; THIEMANN, O. 383

PG201 - Perdas de três corpos em misturas atômicas de Na-K
OLIVEIRA, G. A.; GUTTIERREZ, E. D. M.; FARIAS, K. M.; CASTILHO, P. C. M.; SALCEDO, E. G. I. 384

PG202 - tabular2vec: mapeando dados tabulares através do problema de graph-cut
RESENDE, B. M. F.; COSTA, L. F. 385

PG203 - Fase geométrica, Efeito Aharonov-Bohm, e as bases da Mecânica Quântica
ISRAEL, I.; MAIA, L. P. 386

PG204 - Predição de interações miRNA-mRNA com Predictive Bi-Clustering Trees
ILIDIO, P.; CERRI, R.; THIEMANN, O.; SANTOS, R. A. C.; FRAJACOMO, H. C. 387

PG205 - Nova física fundamental em astropartículas: invariância de Lorentz
DALLOUL, H. Y.; SOUZA FILHO, L. V. 389

PG206 - Simetria e métrica para hamiltonianos não-hermitianos dependentes do tempo
SILVA, L. F. A.; DOURADO, R. A.; MOUSSA, M. H. Y. 390

PG207 - When clock and system interact: Page-Wootters' mechanism
MENDES, L.; SOARES PINTO, D. O. 391

PG208 - Análise evolutiva e estrutural de genes associados ao diabetes mellitus tipo 2
MOTA, D.; MARCO, R.; SETUBAL, J. C. 392

PG209 - Prospecção da interface de interação no processo de polimerização da enzima glutaminase C
ABREU, F. M. O.; RODRIGUES, C. T.; DIAS, S. M. G.; AMBRÓSIO, A. L. B. 394

PG210 - Estratégias em modelagem molecular para a identificação de novos ligantes candidatos à fármacos para a leishmaniose
TELES, H.; ANDRICOPULO, A. D.; VALLI, M.; FERREIRA, L. L. G. 395

PG211 - Matematização da ciência antes de Galileu
FERREIRA, C. T. T.; SILVA, C. C. 397

PG212 - Simple-Z: a portable and low-cost electrical impedance spectrometer for application in education and in biosensing
BUSCAGLIA, L. A.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 398

PG213 - Genosensors on gold nano-islands to detect SARS-CoV-2
OITICICA, P. R. A.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; SOARES, J. C.; SOARES, A. C.; MELENDEZ, M. E. 399

PG214 - Análise da influência de elementos de transposição do clado CR1 na arquitetura do genoma do Schistossoma mansoni
CHEROBIN, E.; ARAÚJO, A. P. U. 400

PG215 - Calibrating stock prices using Neural SDE's
SOUZA, H. R. 401

PG216 - Influência de algumas características topológicas na estabilidade e complexidade de redes neurais aleatórias.
TEODOSIO, N. 402

32

IC1

Introdução aos métodos de Monte Carlo quântico e suas aplicações na física nuclear

LIMA, M.[1]; MADEIRA, L.[1]

lmmathias@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Simulações computacionais têm um papel imprescindível no estudo dos sistemas físicos e atuam de forma complementar aos experimentos e à física puramente teórica. Dessa forma, introduzimos os métodos de Monte Carlo quântico (QMC) como métodos numéricos bastante úteis para sistemas de muitos corpos em diversas áreas (1), sendo a física nuclear uma delas. Assim, com o objetivo de obter familiaridade não somente com métodos de QMC (como Monte Carlo variacional), mas também com técnicas gerais da física computacional, propusemos sua aplicação em sistemas simples com solução analítica conhecida, como o poço de potencial infinito (2) e o oscilador harmônico (3), e também uma introdução do contexto de partículas idênticas (bósons e férmions), que requer o postulado da simetrização da função de onda. No caso fermiônico, empregamos o determinante de Slater para obter uma função de onda antissimétrica. Em resumo, esses passos são de suma importância na transição para um problema mais complexo: o estudo de um modelo para a matéria neutrônica a baixas densidades em analogia com gases de Fermi ultrafrios.

Palavras-chave: Monte Carlo qauântico. Física nuclear.

Referências:

1 FOULKES, W.M.C.; MITAS, L.; NEEDS, R. J.; RAJAGOPAL, G. Quantum Monte Carlo simulations of solids. **Reviews of Modern Physics**v.73,n.1.p.33,2001. 2 CANABRAVA, R.; VITIELLO, S.A. Partícula em um poço de potencial Infinito e o Método variacional de Monte Carlo. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 25, n.1,p. 35–39, 2003.. 3 REIS M.A. dos.; VITIELLO, S.A. Método variacional com Monte Carlo aplicado ao oscilador harmônico quântico. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 28, n.1,p. 45–50, 2006.

IC2

Estudo da microfabricação com pulsos de femtossegundos em vidros Teluretos

BUOZZI, M. T.[1]; SANTOS, S. N. C.[1]

mariobuozzi2332@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Pulsos de femtossegundos apresentam características que os tornam interessantes para diversos estudos em óptica não linear; devido a sua curta duração temporal eles apresentam larga banda espectral e altas intensidades de pico, sendo capazes de promover mudanças estruturais localizadas em materiais (1), tornando possível a produção de micro-estruturas com distintas propriedades ópticas, as quais podem ser usadas em dispositivos ópticos.Neste trabalho, investigamos a estruturação em vidros teluretos com pulsos de femtossegundos, visando determinar a fluência de limiar, energia por unidade de área acima da qual ocorre a estruturação das amostras. Vidros teluretos são materiais interessantes para aplicações em Fotônica por apresentarem altos índices de refração linear, ampla janela de transmissão e ltas não linearidades.(2) Foram utilizadas três amostras, a fim de verificar o feito de modificadores da rede do vidro telureto no processo de microfabricação com pulsos de femtossegundos. A matriz principal é formada por 75TeO2 – 15B2O3 – 10Nb2O5 (%mol), que será chamada de TBN0. Os modificadores são 1Ta2O5 e 1ZrO2 (%mol), que substituem 1Nb2O5 cada, dando origem a composição 75TeO2 – 15B2O3 – 9Nb2O5 – 1Ta2O5 (%mol), denominada TBN1, e também 75TeO2 – 15B2O3 – 8Nb2O5 – 1Ta2O5 – 1Nb2O5 (%mol), nomeada TBN2. O processo de fabricação nas amostras foi feito com um laser de Ti:Safira operando em 800 nm, com taxa de repetição de 5 MHz e pulsos de 80 fs. A amostra é posicionada sobre um estágio de translação controlado por motores, de tal forma que experimentamos diferentes velocidades de varredura. Determinamos as fluências de limiar para cada conjunto objetiva-velocidade-amostra, sendo 0,34 nJ/μm2 para TBN0, 0,48 nJ/μm2 para TBN1 e 0,57 nJ/μm2 para TBN2, no caso da objetiva de 20x e velocidade de 50 μm/s. Portanto, observa-se um aumento considerável na fluência limiar com a incorporção demodificadores na amostra. Resultados semelhantes foram obtidos para a objetiva de 40x e velocidades de 50 μm/s e 100 μm/s. Estes resultados permitem determinar as melhores condições para a confecção de dispositivos fotônicos como, por exemplo, guia de ondas 3D.

Palavras-chave: Óptica não linear. Microfabricação. Laser de femtossegundo.

Referências:

1 GATTASS, R.R.; MAZUR, E.. Femtosecond laser micromachining in transparent materials. **Nature Photonics,** v.2 , p.219-225,2008.DOI:https://doi.org/10.1038/nphoton.2008.47. 2 JHA, A. *et al.* Review on structural, thermal, optical and spectroscopic properties of tellurium oxide based glasses for fibre optic and waveguide applications. **International Materials Reviews**. v.57,p. 357,2012.DOI 10.1179/1743280412Y.0000000005.

IC3

Armadilha bidimensional arbitrária para gases atômicos degenerados

CASTILHO, P. C. M.[1]; CUNHA, P. H. C.[1]

patricia.castilho@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A obtenção de condensados de Bose-Eintein (do inglês, *Bose-Einstein condensates* - BECs) (1) e gases degenerados de Fermi, em sistemas de gases ultra-frios, é de extrema relevância para os estudos contemporâneos de física atômica e molecular. Gases quânticos ultra-frios oferecem um cenário único para simulações quânticas em sistemas de muitos corpos interagentes, sendo possível, através de redes ópticas (do inglês, *optical lattices*), criar uma vasta gama de potenciais que apresentem controle quase que total sobre seus parâmetros (como profundidadede e espaçamento da rede), além da viabilidade em se alterar ou cancelar, por completo, tais potenciais durante o experimento.As propriedades de gases degenerados aprisionados (perfil de densidade, temperatura crítica, relações de dispersão, propriedades de transporte, *etc.*) dependem do potencial de aprisionamento ao qual estão submetidos. O recente avanço na tecnologia de dispositivos de modulação espacial da luz (do inglês, *Spatial light modulator* - SLM) possibilitou a produção de feixes de laser com perfis de intensidade arbitrários, com precisão limitada apenas pelo limite de difração do sistema óptico que o feixe atravessa. Com o auxílio deste tipo de dispositivo, o primeiro condensado de Bose-Einstein homogêneo foi produzido em 2013. A extensão para potenciais homogêneos bidimensionais veio alguns anos mais tarde. (2) Neste trabalho, analisa-se a criação de sistemas de gases atômicos degenerados em duas dimensões através do uso de potenciais bidimensionais que podem ser realizados em laboratório a partir do desenvolvimento de uma armadilha óptica arbitrária. Esta armadilha é composta por duas partes: uma rede óptica do tipo *accordion*, responsável por garantir a obtenção de um gás em regime bidimensional a partir de um gás tridimensional; e um potencial bidimensional arbitrário, resultante da modelagem de um feixe da laser de perfil de intensidade gaussiano, que atravessa um telescópio após sofrer reflexão em um *Digital Micromirror Device* (DMD). Até o momento da confecção deste resumo, foram realizadas simulações em relação a criação desta armadilha óptica, e a influência que uma resolução óptica finita tem sobre a passagem do feixe de laser pelo telescópio, buscando então otimizar a geração destes potenciais no plano atômico levando-se em consideração também a limitação binária imposta pelo uso de um DMD. Ademais, simularam-se ainda sistemas quânticos condensados aprisionados em potenciais bidimensionais. Estes sistemas são descritos pela equação de Schrödinger não linear chamada de equação de Gross-Pitaevskii (do inglês, *Gross-Pitaevskii equation* - GPE) a qual, a partir da evolução temporal da função de onda por meio do uso de tempo imaginário (3), nos permite obter o estado fundamental do gás quando confinado por diferentes potenciais externos. A meta para o futuro é implementar o aparato experimental estudado nas simulações em experimentos já existentes no grupo de pesquisa CEPOF destinados a produção de BECs de duas espécies de interação variável: sódio e potássio.

Palavras-chave: Gases atômicos bidimensionais. Redes ópticas. Potenciais arbitrários.

Referências:

1 ANDERSON, M. H. *et al.* Observation of Bose-Eintein condensation in a dilute atomic vapor. **Science**, v. 269, n. 5221, p. 198-201, 1995.

2 VILLE, J. *et al*. Loading and compression of a single two-dimensional bose gas in an optical accordion. **Physical Review A**, v. 95, n. 1, p. 013632-1-013632-7, 2017. DOI 10.1103/PhysRevA.95.013632.
3 CASTILHO, P. C. M. **New experimental system to study coupled vortices in a two-species Bose-Einstein condensate 23Na - 41K with tunable interactions**. 2017. 213 p. Thesis (Doctor of Science) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

36

IC4

Investigação semiclássica de armadilhamento magneto-óptico com número reduzido de feixes de luz

ALVARENGA, L. N. C.[1]; HENN, E.[1]

larissa.nolasco@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Uma armadilha magneto-óptica convencional (MOT) consiste em 3 pares de feixes de laser contrapropagantes com polarizações circulares opostas entre si em um campo magnético quadrupolar. A polarização juntamente com o campo magnético causará uma força dependente da posição, de forma que o átomo a sentirá sempre no sentido do centro do sistema de coordenadas e, portanto, permanecerá aprisionado. (1) O tratamento semiclássico é suficiente para descrever uma armadilha atuando em um regime no qual a largura da linha de transição atômica é muito maior que a frequência associada ao recuo fotônico. Desse modo, a dinâmica do sistema pode ser descrita pela força média causada por um grande número de processos de absorção e emissão espontânea de fótons. Então, a força sentida pelos átomos aprisionados tem a forma geral de um oscilador harmônico amortecido, cujas constantes de mola a amortecimento dependem da taxa de espalhamento da transição escolhida, da intensidade da luz e dessintonia do laser. Porém, é possível recobrar o tratamento semiclássico para MOTs operando em um regime de transição estreita quando a intensidade da luz é suficientemente grande para que haja um alargamento dessa linha de transição. (2) Nesse caso, a força máxima do espalhamento é poucas vezes maior que a força peso atuando nos átomos, então é possível utilizar essa influência da gravidade nas armadilhas, excluir o feixe propagante na direção da gravidade (3) e explorar diferentes configurações de MOT. Neste projeto, estudamos esse último regime de operação do MOT para realizar os cálculos analíticos de configurações alternativas de aprisionamento, com menos feixes e com a assistência da gravidade, e compará-los com os resultados obtidos para uma armadilha convencional de 6 feixes.

Palavras-chave: Interação da radiação com a matéria. Aprisionamento de átomos. Armadilha magneto-óptica.

Referências:

1 FOOT, C. J. **Atomic physics**. Oxford: Oxford University Press, 2005. 331 p. (Oxford master series on atomic, optical and laser physics).

2 CHANELIÉRE, T. *et al.* Three dimensional cooling and trapping with a narrow line. **The European Physical Journal D**, v. 46, n. 3, p. 507-515, Mar. 2008. DOI: https://doi.org/10.1140/epjd/e2007-00329-8.

3 ILZHÖFER, P. *et al.* Two-species five-beam magneto-optical trap for erbium and eysprosium. **Physical Review A**, v. 97, n. 2, p. 023633-1-023633-6, Feb. 2018. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.023633.

37

IC5
Identificando as fronteiras da física

FONSECA, M. S.[1]; COSTA, L. F.[1]; BENATTI, A.[1]; ARRUDA, H. F.[1]
matheus.pic.silva@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos principais aspectos que torna a ciência tão eficiente no entendimento da realidade é a modelagem matemática, ou seja, o processo de representação de sistemas reais por meio de abstrações lógico-matemáticas. Entre essas abstrações estão os grafos, essenciais no estudo de redes complexas, área esta que teve grandes avanços nas últimas décadas graças à sua versatilidade nas mais diversas aplicações e aos continuados desenvolvimentos dos meios computacionais. (1) Virtualmente é possível modelar qualquer sistema discreto por meio de uma rede. Exemplos incluem sistemas de transporte, comunicações e conhecimento. Neste projeto, inspirado no trabalho de Silva *et al.* (2), pretende-se modelar o conhecimento das ciências físicas com ênfase no estudo de suas fronteiras. Para tanto, serão criadas e analisadas diversas redes de conhecimento que representem subáreas amplas, como eletromagnetismo, mecânica quântica, entre outras, e então estimar suas bordas utilizando-se de conceitos de redes complexas, em particular a medida chamada acessibilidade. (3) As motivações desta pesquisa incluem melhor entender o inter-relacionamento entre as subáreas consideradas e identificar as fronteiras do conhecimento atual.

Palavras-chave: Conhecimento. Modelagem. Redes complexas. Fronteira.

Referências:

1 COSTA, L. da F. *et al.* Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, Jan. 2007. DOI 10.1080/00018730601170527.
2 SILVA, F. N. *et al.* Identifying the borders of mathematical knowledge. **Journal of Physics A**, v. 43, n. 32, p. 325202-1-325202-7, Ago 2010. DOI 10.1088/1751-8113/43/32/325202.
3 TRAVENÇOLO, B. A. N.; VIANA, M. P.; COSTA, L. da F. Border detection in complex networks. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 6, p. 063019-1-063019-17, June 2009. DOI 10.1088/1367-2630/11/6/063019.

38

IC6

A malha mais curta ligando cidades: algoritmos bio-inspirados

FLORENTINO, B. R.[1]; FONTANARI, J. F.[1]

brunorf1204@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O problema da árvore mínima de Steiner pode ser enunciado de forma simplória como o conjunto de caminhos que interligam um grupo finito de pontos. Nesse contexto, nos anos 2000 foi descoberto que o plasmódio do *Physarum polycephalum* consegue encontrar uma malha eficiente entre determinados pontos e até mesmo encontrar o caminho mais curto em um labirinto. Baseado nessa premissa foi implementado um estudo sobre esse tema em que é aproximado o comportamento de uma agregação de células desse protozoário por meio de autômatos celulares. (1) Autômatos celulares são sistemas com espaço e tempo discretos cujo comportamento é regido por regras locais aplicadas a cada elemento. (2) Neste estudo, foi utilizado um autômato celular bidimensional em que cada estado do organismo num certo instante de tempo é representado por uma matriz, e a evolução temporal depende dos elementos imediatamente acima, abaixo, à esquerda e à direita da célula em análise. Primeiramente, foi implementado o modelo denominado padrão baseado em partícula vaga, que simula a movimentação da agregação do protozoário em um plano, através da transferência de uma célula em contato com o meio exterior para uma região inicialmente vazia de forma a conservar o número total de células. Em seguida, esse modelo foi modificado para simular o comportamento do protozoário na presença de comida. Nessa situação, a agregação de células pode se mover no sentido de explorar o plano, como anteriormente, mas também transportar células para dentro das fontes de alimentos, de forma a se concentrar nessas regiões o que diminui o número total de células. Por consequência, quando a agregação inicialmente cobre todas as fontes de alimento as células diminuem até uma quantidade mínima que conecta todas as fontes. Nesse estado, o caminho ligando as fontes é a aproximação da árvore mínima de Steiner.

Palavras-chave: *Physarum polycephalum* . Autômato celular.

Referências:

1 GUNJI, Y-P. *et al.*. An adaptive and robust biological network based on the vacant-particle transportation model. **Journal of Theoretical Biology**, v. 272, n. 1, p. 187-200, 2011.
2 WOLFRAM, S. **A new kind of science**. Champaign: Wolfram Media, 2002.

IC7

Aumento de fluorescência induzida por agregados em derivados de benzotiadiazolas: um estudo em misturas de solventes

AKIYAMA, J.[1]; BONI, L.[1]; COCCA, L. Z.[1]; GALINDO, D. M.[1]

julia.akiyama@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Determinar propriedades ópticas de compostos orgânicos, através de técnicas espectroscópicas, têm desenvolvido importantes avanços para estudos de processos fotofísicos e fotoquímicos. A maioria das moléculas orgânicas, devido à disposição dos átomos em sua arquitetura, tendem a ser muito emissivas no seu estado diluído e, sofrem extinção de fluorescência no seu estado agregado. Introduzir grupos funcionais polares nessas estruturas pode aumentar sua miscibilidade na água, mas, a intrínseca hidrofobicidade de seus componentes aromáticos causa a formação de nano agregados. Neste estado, essas moléculas tendem a formar espécies menos emissivas, guiando a uma redução no rendimento quântico de fluorescência. Por outro lado, o efeito oposto pode ser observado, em que as moléculas possuem grupos de rotação livres. Estas, quando diluídas, no estado excitado perdem energia via rotações, aumentando o decaimento não radiativo. Já no estado agregado, há restrição desses movimentos através de interações não covalentes entre os anéis aromáticos. Nessas circunstâncias, a emissão de fluorescência aumenta, assim como o rendimento quântico. Tal efeito é chamado Agreggation-Induced Emission (AIE) e tem desencadeado uma ampla gama de aplicações tais como, em OLEDs, sensores de controle e geração de imagem em diversas áreas biomoleculares. (1) No presente trabalho, foram utilizadas quatro moléculas fluorescentes derivados de benzotiadiazolas (2), Sendo duas com grupo ariloxi ligado ao núcleo e outras duas análogas simétricas sem esse grupo. Com o objetivo de verificar a influência desses diferentes grupos, foram feitas soluções mudando a polaridade do sistema com o acréscimo de água para que os estados agregados dessas moléculas fossem analisados. Além disso, foram utilizadas técnicas de fluorescência resolvida no tempo para quantificar os tempos de vida do estado excitado das soluções. O efeito de aumento do rendimento quântico foi observado em ambas as moléculas ArO-BTD-Ar. No estado agregado, portanto, os análogos simétricos formaram agregados, possivelmente do tipo C-H-, responsável pelas rotações livres no estado excitado desfavorecendo o decaimento radiativo, ao contrário do outro grupo, que possuíram aumento em cerca de 7 e 10 vezes na eficiência quântica de fluorescência. O resultado indica que possíveis aplicações podem ser realizadas, além do uso em medidas de fluorescência induzidas por absorção multifotônica, que tem chamado muita atenção para novas pesquisas. (3)

Palavras-chave: Benzotiadiazola. Fluorescência. Propriedades fotofísicas.

Referências:

1 LIANG, J.; TANG, B. Z.; LIU, B. Specific light-up bioprobes based on AIEgen conjugates. **Chemical Society Reviews**, v. 44, n. 10, p. 2798-2811, 2015.

2 PAZINI, A. *et al.* Designing highly luminescent aryloxy-benzothiadiazole derivatives with aggregation-induced enhanced emission. **Dyes and Pigments**, v. 178, p. 108377-1-108377-17, 2020. DOI 10.1016/j.dyepig.2020.108377.

3 CHANG, Z-F. *et al.* Rational design of asymmetric red fluorescent probes for live cell imaging with high AIE effects and large two-photon absorption cross sections using tunable terminal groups. **Chemical Science**, v. 7, n. 7, p. 4527-4536, 2016.

IC8

Screening de compostos em linhagem tumoral metastática de próstata

COSTA, F. R. F.[1]; SOUZA, M.[2]; ANDRICOPULO, A. D.[2]

feliperfc@estudante.ufscar.br

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer de próstata (CaP) consiste na principal causa de morte entre os homens, sendo que, a cada ano, mais de 1,5 milhões de indivíduos são diagnosticados e cerca de 366 mil morrem em decorrência de suas complicações, sobretudo relacionadas ao comportamento tumoral metastático. Apesar de amplas, as opções disponíveis de tratamento quimioterápico são altamente tóxicas e provocam efeitos adversos aos pacientes. Isso se deve à dificuldade de diferenciação entre células tumorais e saudáveis, restrições de biodisponibilidade e resistência.(1) Os microtúbulos são elementos estruturais dinâmicos formados pela proteína dimérica tubulina a qual pode ser polimerizada e despolimerizada para garantir um complexo de ancoragem de organelas, diferenciação celular e do aparato mitótico. Perturbações nessas dinâmicas podem bloquear a mitose e a migração celular, favorecendo a apoptose. Moléculas capazes de modularem tais estruturas são promissoras para o desenvolvimento de fármacos com propriedades antitumorais.(2) A técnica de hibridização molecular surgiu como uma estratégia inovadora nos estudos recentes de descoberta de fármacos, compreendendo a combinação de dois ou mais grupos farmacofóricos para gerar uma única molécula com afinidade e atividade farmacocinética aprimoradas.(3) Neste contexto, o presente trabalho de Iniciação Científica visou a realização de um *screening* de moléculas seguras e eficientes com propriedades antitumorais e antimetastáticas como alternativas terapêuticas frente uma linhagem tumoral metastática de próstata. Para isso, 10 compostos (híbridos de quinazolina-chalconas) foram investigados por meio de ensaios celulares para identificação de moléculas com propriedades anticâncer *in vitro*. Os compostos foram sintetizados com base na interação da colchicina no sítio ativo da proteína tubulina. Desta forma, uma linhagem de câncer de próstata (DU-145) e uma linhagem celular de fibroblastos humanos saudáveis (HFF-1) foram avaliadas em ensaios de citotoxicidade para caracterização da potência dos compostos-teste a partir de seus valores de IC50 e a capacidade de inviabilizar seletivamente as células tumorais (índice de seletividade, IS). A viabilidade celular foi verificada pelo ensaio colorimétrico de redução do composto resazurina na fluorescente resorufina (emissão = 588 nm) e os valores de IC50 foram determinados por regressão não-linear de melhor ajuste com auxílio do software *GraphPad Prism 8.0*. Foram identificados 9 híbridos de quinazolina-chalconas com atividade em DU-145 para valores de IC50 $\leq$ 20 μM. Destes, 3 compostos [AQC-02 (1), AQC-04 (2) e AQC-08 (3)] se mostraram seletivos para câncer frente HFF-1 e inibiram a migração em ensaios qualitativos *wound healing* tipo concentração única ($\geq$ 50 % a 10 μM) e dose x resposta (a 10, 5 e 1 μM). Os resultados apontaram para o envolvimento das moléculas no processo migratório e o quão promissoras são para avançar para os ensaios cinéticos direcionados ao alvo macromolecular. Antes disto, um estudo quantitativo em câmara de Boyden revelou que os compostos 1-3 inibiram em 50 % a migração celular nas concentrações de 5,22 $\pm$ 0,50; 6,76 $\pm$ 0,78 e 5,70 $\pm$ 0,65 μM. Desta forma, este trabalho vem acumulando dados importantes que, em consonância, suportam as decisões tomadas na triagem de candidatos a fármacos para o tratamento do câncer de próstata metastático e hormônio-refratário.

Palavras-chave: Câncer de próstata. Ensaios celulares. Migração celular.

Referências:

1 FOUAD, Y. A.; AANEI, C. Revisiting the hallmarks of cancer. **American Journal of Cancer Research**, v.7, n.5,p. 1016-1036, 2017. 2 DEVI TANGUTUR, A. *et al.* Microtubule targeting agents as cancer chemotherapeutics: an overview of molecular hybrids as stabilizing and destabilizing agents. **Current Topics in Medicinal Chemistry**, v. 17, n. 22, p. 2523- 2537, 2017. 3 KERRU, N. *et al.* Recent advances (2015–2016) in anticancer hybrids. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v. 142, p. 179-212, 2017.PMID 28760313.

42

IC9

A implementação do AFORS-HET na simulação de diagramas de bandas de heterojunções de semicondutores nanoestruturados aplicados na fotocatálise da água para geração de H2

ZAMPAULO, L. G. T.[1]; GONÇALVES, R. V.[2]

lg.zam@usp.br

[1]Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

A busca por fontes de energia renováveis nos dias atuais cresceu freneticamente e uma das opções encontradas foi o processo de fotodissociação da molécula da água, o qual utiliza da energia solar para, a partir da água, gerar hidrogênio, que é uma energia limpa, estocável e abundante disponível no mundo. (1) Deste modo, visando realizar o processo de fotocatálise da água de maneira mais eficiente possível, foi estudado uma forma de implementar e simular as estruturas de bandas de materiais semicondutores para facilitar seu estudo e entender melhor os movimentos e fenômenos eletrônicos presentes na estrutura e capazes de serem identificados nos diagramas de bandas, que influenciam a eficiência do processo de fotocatálise. A implementação ocorreu no software AFORS-HET (2) e se deu primeiramente com o estudo das funções do software, por meio da leitura do manual do software e livro (3), verificando suas capacidades e limitações. Posteriormente, a fim de verificar na prática o progresso no entendimento do que o AFORS-HET é capaz de simular, foi realizado reproduções de diagramas de bandas já presentes na literatura, sejam eles relacionados à aplicações na fotocatálise ou não, visto que o objetivo aqui era apenas conhecer a ferramenta. Por fim, foi iniciada a simulação e estudo do diagrama de bandas da estrutura BiVO4/CuWO4 a fim de correlacionar os resultados simulados com o da fotocatálise da água, desta mesma estrutura, tornando possível verificar um provável aumento na eficiência do processo.

Palavras-chave: AFORS HET. Diagrama de bandas. Fotossíntese artificial.

Referências:

1 TACHIBANA, Y.; VAYSSIERES, L.; DURRANT, J. R. *et al.* Artificial photosynthesis for solar water-splitting. **Nature Photonics**, v. 6, n. 8, p. 511-518, Aug. 2012.

2 VARACHE, R., *et al.* Investigation of selective junctions using a newly developed tunnel current model for solar cell applications. **Solar Energy Materials Solar Cells**, v. 141, p. 14-23, Oct. 2015. DOI 10.1016/j.solmat.2015.05.014.

3 STANGL, R.; LEENDERTZ, C.; HASCHKE, J. Numerical simulation of solar cells and solar cell characterization methods: the open-source on demand program AFORS-HET. *In*: RUGESCU, R. D. (ed.) **Solar energy**. Rijeca: Intech, 2010. cap. 14, p. 319-352.

IC10
Bases da teoria da representação e aplicações em física

PINTO, V. P.[1]; MENCATTINI, I.[2]
viniciusppinto@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

A teoria da representação de grupos tem uma larga lista de aplicações na matemática, física e química, sendo algumas delas a análise de estruturas atômicas, cristalografia e a classificação das simetrias de um sistema físico. (1) Esta teoria faz uso de álgebra linear e abstrata e da análise de forma combinada que formando bases matemáticas da mecânica quântica, permitindo as predições dos estados elementares dos sistemas quânticos a partir de suas simetrias. Este projeto tem como objetivo expor o estudante a bases da teoria da representação de grupos de Lie compactos com o intuito de analisar os orbitais eletrônicos e o momento angular dos modelos atômicos, com ênfase no caso particular do átomo de hidrogênio, uma vez que sua generalização fornece análises para outros átomos e permite a introdução da tabela periódica dos elementos. Por isso, este trabalho apresenta um extenso desenvolvimento das ferramentas matemáticas, a aplicação para simetria esférica do átomo de hidrogênio, a forma funcional do potencial de Coulomb e uma visualização dos orbitais atômicos a partir da representação da função de onda do elétron por harmônicos esféricos. (2) A metodologia da pesquisa consiste em um estudo dirigido da Referência (3) Em particular, foi primeiramente analisada a representação dos estados elementares dos sistemas físicos, mais especificamente sistemas quânticos, que, em uma segunda etapa, foi aplicada ao caso de átomo de hidrogênio.

Palavras-chave: Átomo de hidrogênio. Teoria atômica. Teoria da representação.

Referências:

1 STERNBERG, S. **Group theory and physics.** Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
2 BEISER, A. **Concepts of modern physics.** 6th ed. New York: McGraw-Hill, 2003.
3 SINGER, S. F. **Linearity, symmetry, and prediction in the hydrogen atom.** Cham: Springer, 2005. (Undergraduate texts in mathematics).

IC11

Avaliação automática de redações em português usando redes neurais

PENTEADO, M. Z. C.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[2]

matezcp@usp.br

[1]Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

A crescente importância de provas de redação em vestibulares e concursos públicos, tal como seu alto custo de correção, tem impulsionado a busca por métodos mais baratos e eficazes para a pontuação desse tipo de texto. Nesse contexto insere-se a Avaliação Automática de Redações (AAR), termo que se refere ao uso de técnicas estatísticas e de processamento de linguagem natural (PLN) para pontuar textos em prosa sem intervenção humana. Este Projeto visa a investigar e implementar métodos de AAR para o português, principalmente a partir do uso de aprendizado de máquina com redes neurais profundas (*deep learning*). Será feita uma investigação criteriosa dos avanços já alcançados para a língua inglesa, como, por exemplo, redes neurais *feedforward* e redes recorrentes, além de métodos de extração de atributos (*features*) textuais como *word embeddings*, redes neurais convolucionais (1) e o *Bidirectional Encoder Representations from Transformers* (BERT). O sistema a ser implementado usará para testes uma base de dados com mais de 100.000 redações corrigidas por humanos, cuja pontuação será usada como referência. A meta é obter um desempenho para o sistema inteligente semelhante ao de um corretor humano.

Palavras-chave: Avaliação automática de redações. Aprendizado de máquina. Rede neural. Processamento de linguagem natural.

Referências:

1 LECUN, Y. *et al.* Gradient-based learning applied to document recognition. **Proceedings of the IEEE**, v. 86, n. 11, p. 2278-2324, Nov. 2018.

IC12
Processos epidêmicos em redes temporais

CAMACHO, R. T.[1]; RODRIGUES, F. A.[2]

ricardotetti.camacho@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

Modelos de propagação de epidemias e rumores são fundamentais para a previsão e controle da transmissão de agentes infecciosos e comportamento social. A maioria dos modelos desenvolvidos em redes complexas considera apenas estruturas estáticas, onde a conexões são mantidas ao longo do tempo. Apenas recentemente, modelos de propagação de epidemias em redes temporais foram propostos. Nessas redes, as conexões não são estáticas,variando durante a propagação do agente infeccioso. (1) Nesse trabalho, objetivamos estudar tais modelos e analisar processos epidêmicos em redes de agentes móveis. Vamos modelar epidemias e rumores e avaliar como a velocidade de movimentação, raio de interação e relevo, onde os agentes se movimentam,influencia no número de infectados. Os resultados obtidos permitirão uma melhor compreensão sobre a propagação de informação em redes complexas com estrutura variante no tempo.

Palavras-chave: Modelos epidemiológicos. Redes complexas. Agentes móveis

Referências:

1 FRASCA, M. *et al.* Dynamical network model of infective mobile agents. **Physical Review E**, v. 74, n. 3, p. 036110-1-036110-5, Sept. 2006.

IC13

Avaliação de compostos em patógenos bacterianos multirresistentes como parte do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos - CIBFar

CARNIELLI, G. V.[1]; CAMARGO, I. L. B. C.[1]; CARVALHO, I.[1]; KALA, D. R. B.[1]

gabriellavidal@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, de acordo com o relatório anual de 2020 da Organização Mundial da Saúde (OMS), o mundo ainda não está conseguindo desenvolver tratamentos antibacterianos necessários, apesar da crescente conscientização sobre a ameaça urgente da resistência aos antibióticos. Nenhum dos 43 antibióticos que estão atualmente em fase de desenvolvimento clínico abordam suficientemente o problema da resistência das bactérias mais perigosas do mundo aos medicamentos. (1) Em vista disso, entende-se que é fundamental produzir tecnologias eficazes para controlar estes microrganismos. No Brasil, o número de laboratórios e empresas do setor farmacêutico que investem em pesquisa para novos antimicrobianos vem caindo ao longo dos anos, dada sua baixa lucratividade. Como exemplo, tem-se o recente desabastecimento de penicilina no país, provocado pelo baixo retorno financeiro de sua fabricação. (2) Dessa forma, o Laboratório de Epidemiologia e Microbiologia Moleculares (LEMiMo) tem como principal objetivo ajudar a encontrar possíveis fármacos a partir de compostos enviados por integrantes do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar), um dos CEPIDs da FAPESP. Atuando na etapa pré-clínica de desenvolvimento dos extratos que são enviados ao LEMiMo, este estudo visa a determinação de parâmetros como a Concentração Inibitória Mínima (CIM) e a Concentração Bactericida Mínima (CBM) frente a uma lista de bactérias de diferentes espécies e linhagens do LEMiMo. Para a otimização de tempo e insumos, é realizada uma triagem inicial em todos os compostos contra 8 linhagens padrão, sendo 4 gram-positivas e 4 gram-negativas. Caso o extrato apresente boa atividade e haja quantidade suficiente, esses testes são expandidos para linhagens clínicas. Além da CIM e CBM, há a realização de testes de erradicação de biofilme formado pelas linhagens de *Staphylococcus epidermidis* e *S. aureus*, recentemente adicionada ao protocolo. Com isso, é possível observar se o extrato tem ação antibacteriana e também ajuda na erradicação do biofilme, ou não. Por outro lado, nem todos os compostos que agem reduzindo a biomassa do biofilme tem ação antibacteriana. Durante o período de 07/20 à 05/21, 64 extratos foram testados em diferentes ensaios. Com 48 triagens realizadas, é possível observar que 4 desses extratos apresentaram atividade contra pelo menos uma linhagem bacteriana, com um espectro de ação entre 7 das 8 linhagens testadas. Dentre os compostos e linhagens positivas na triagem inicial, a CIM variou de 128 a 512 μg/ml com 2 deles apresentando atividade bactericida contra 3 linhagens no total. Para os ensaios de biofilme, 62 compostos à 512 μg/m foram testados contra biofilmes e 47 apresentaram redução significativa para pelo menos uma espécie. Um total de 27 dos 62 compostos foram capazes de erradicar 50% ou mais de biofilme formado em pelo menos uma das espécies. Dentre os maiores percentuais de erradicação observado há extratos com 100%, 86% e 83%, ambos contra S. aureus. Na maioria dos casos, testes pré-clínicos são os primeiros resultados in vitro de atividade biológica que um extrato pode apresentar, com sua elevada importância devido às decisões que desenrolam a partir de tais resultados.

Palavras-chave: Multirresistência. Antimicrobianos. Biofilme.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **2020 antibacterial agents in clinical and preclinical development**: an overview analysis. Geneva: WHO, 2021.
2 ESTRELA, T. S. Resistência antimicrobiana: enfoque multilateral e resposta brasileira. *In*: BRASIL. Ministério da Saúde. Assessoria de Assuntos Internacionais de Saúde. **Saúde e política externa**: os 20 anos da assessoria de assuntos internacionais de saúde (1998-2018). Brasília: Ministério da Saúde, 2008. p. 307-327.

48

IC14

Microfabricação com pulsos de femtossegundos em vidros magnéticos

MENEZES, B.[1]; SANTOS, S. N. C.; HENRIQUE, F. R.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]

beatrizcm01@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Motivados pelas potenciais aplicações em processamento de materiais e dispositivos fotônicos, esforços consideráveis vêm sendo feitos para desenvolver técnicas que permitam a utilização de pulsos de femtossegundos para a fabricação e estruturação de materiais. Do ponto de vista de dispositivos ativos, uma opção interessante são materiais que apresentam efeito magneto-óptico, também conhecido como efeito Faraday (1), o qual é caracterizado pela constante de Verdet.Neste projeto, dedicamo-nos ao processamento com pulsos de femtossegundos de uma amostra do vidro magnético CaLiBO (tetraborato de cálcio-lítio) dopada com 2% Tb_4O_7, visando investigar as propriedades da amostra para microfabricação no volume. Foram obtidas as energias de limiar necessárias para a produção de dano na amostra, para as velocidades de *scan* de 10, 50 e 200 $\mu m/s$ como sendo, respectivamente, (36 ± 1), (33 ± 1) e (35 ± 1) nJ. Verifica-se que esses valores estão em acordância com a energia de limiar para ablação reportada na literatura.(2) Por fim, foi realizada a investigação das propriedades magneto-ópticas das amostras CaLiBO com 1 e 2% Tb_4O_7 em sua forma *bulk* através da medição da constante de Verdet, que foram obtidas como sendo, respectivamente, (-240 ± 20) e $(-670 \pm 10)/T \times m$. Estes resultados encontram-se de acordo com estimativas baseadas na composição das amostras.(3)

Palavras-chave: Pulsos de femtossegundo. Microfabricação. Magneto-óptica.

Referências:

1 SHIH,T.; GATTASS, R. R.;MENDONÇA, C. R.;MAZUR, E. Faraday rotation in femtosecond laser micromachined waveguides. **Optics Express**, v. 15,n.9,p.5809-14,2007.
2 SANTOS, S. N. C. **Third-order optical nonlinearities and fs-laser microfabrication of 3D waveguides in borate glasses doped with rare-earth ions**. 2019. 117p. Thesis (Doctor of Science.) – Escola de Engenharia de São Carlos, Univesidade de São Paulo, São Carlos, 2019. 3 YAMANE, M.; YOSHIIUKI, A. **Glasses for photonics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

IC15
Modelagem tight-binding do twisted bilayer graphene

PIETRO, N.; SIPAHI, G.[1]
nickolas_pietro@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Por décadas, acreditava-se que materiais bidimensionais eram instáveis demais para existir, até a descoberta de materiais 2D livres em 2004. (1) Um destes materiais é o grafeno, uma folha de átomos de carbono dispostos no formato de favos de mel, que serve de base para outros materiais como o grafite, os nanotubos de carbono e os fulerenos. Além do interesse em suas propriedades eletrônicas, o grafeno demonstrou possuir mais um aspecto especial: em 2018 descobriu-se a ocorrência de supercondutividade não convencional em uma configuração específica de grafeno (2), que consiste em duas placas de grafeno sobrepostas com um ângulo de rotação entre, o chamado grafeno de bicamadas torcidas (tBG, do inglês *twisted bilayer graphene*). O motivo pelo qual este fenômeno ocorre ainda não está claro. Buscamos compreender melhor as propriedades do tBG no intuito de procurar entender melhor a supercondutividade do grafeno, e assim utilizamos o método de *Tight-Binding* (TB) para modelar um sistema de tBG. O método *Tight-Binding* utiliza uma versão discretizada da equação de Schrödinger para um elétron exposto a um potencial periódico, isto é, o potencial no interior de um cristal. Praticamente, estas aproximações são vistas como se o elétron estivesse fortemente ligado a um dos átomos do cristal, e assim só podendo ocupar posições definidas de forma discreta do sistema, por isso o método recebe este nome. No entando, a modelagem do tBG não é simples. Apesar do TB funcionar muito bem para uma folha única de grafeno, para o tBG é necessário mais cuidado, uma vez que a interação entre as camadas de grafeno não é trivial, e efeitos de muitos corpos influenciam o sistema. (3) Além disso, o tBG possui uma segunda periodicidade: quando as camadas são vistas sobrepostas, o tBG forma figuras de Moiré, que são padrões periódicos de disposição dos átomos com um espaçamento muito maior do que aquele da periodicidade das redes de grafeno. Essas figuras formam regiões de alinhamento dos átomos das duas redes que podem ser classificadas como "AA"ou "AB", e que possuem importância para a modelagem da interação entre as camadas de grafeno. Obtendo-se as funções de onda discretas através do TB, buscamos analisar as simetrias contidas nestas funções de onda, a fim de procurar por efeitos de interações a longa distância devido às figuras de Moiré e por efeitos locais das propriedades físicas do grafeno.

Palavras-chave: Tight-binding. Física do Estado Sólido. Física da Matéria Condensada

Referências:

1 NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The rise of graphene. **Nature Materials**, v. 6, n. 3, p. 183-191, 2007. 2 CAO, Y *et al.* Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. **Nature**, v. 556, n. 7699, p. 43-50, 2018. 3 GUINEA, F.; WALET, N. R. Continuum models for twisted bilayer graphene: effect of lattice deformation and hopping parameters. **Physical Review B**, v. 99, n. 20, p. 205134, 2019.

50

IC16

Estudos ópticos espectroscópicos lineares e não lineares em uma nova classe de porfirinas

NASCIMENTO, C. S.[1]; BONI, L.[1]

carol_salgado@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A principal finalidade deste projeto é o estudo e caracterização espectroscópica de três porfirinas sintetizadas recentemente com a finalidade de serem usadas para aplicações em terapia fotodinâmica e microbiologia. As porfirinas em questão possuem quatro grupos ligantes de fluoreno ao redor do anel macrociclo e podem ser descritas como uma porfirina de base livre (H_2TFluorPor), uma possuindo um íon de zinco no interior do anel macrociclo (ZnTFluorPor) e uma com um íon de cobre também no interior (CuTFluorPor). Por serem inéditas, o estudo de suas propriedades espectroscópicas, utilizando técnicas espectroscópicas bem conhecidas, é extremamente importante para se determinar as possíveis aplicações destas em dispositivos, microbiologia e fototerapia dinâmica contra o câncer. (1) As porfirinas foram preparadas a partir de sua dissolução em diclorometano (DCM) para então realizar a determinação de seus espectros de absortividade molar, o qual foi obtido a partir da aplicação da lei de Beer-Lambert (2) e de emissão de fluorescência. Além disso, foram realizadas medidas de eficiência quântica de fluorescência, visando a determinação das taxas de decaimento radiativo e não radiativo. Por último, foram realizadas medidas dos tempos de vida de fluorescência, uma das propriedades mais importantes de uma molécula fluorescente, pois é o que define a janela temporal do fenômeno dinâmico ocorrido além de fornecer outras informações sobre reações intermoleculares. Obtendo os espectros de absorção na região do UV-Vis dessas moléculas, foi possível observar que a banda de Soret, de absorção máxima, se dá em aproximadamente 425 nm, e as bandas Qs se mostram entre 500 e 680 nm. Estas são fortemente afetadas pelos íons metálicos devido ao aumento da simetria molecular. A partir desse espectro, também foi possível se observar o aparecimento de duas bandas na região de 240 nm a 330 nm, as quais estão relacionadas aos quatro grupos fluoreno inseridos ao anel macrocíclico. Percebeu-se a partir do espectro de fluorescência das moléculas, que as porfirinas de base livre e zinco emitem com máxima intensidade em 660 nm, enquanto a porfirina de cobre emite em 612 nm. Com isso e com medidas similares da hematoporfirina, já bem caracterizada, pôde-se calcular os rendimentos quânticos de fluorescência de cada porfirina a partir do método de Brower (3), os quais se mostraram baixos, com a porfirina de base livre apresentando o maior valor entre eles, de 3.81%. Por fim, os tempos de vida de fluorescência foram medidos a partir da técnica de fluorescência resolvida no tempo com pulsos de femtossegundos. Os resultados mostraram uma diminuição do tempo de vida de fluorescência com a inserção dos íons metálicos ao centro do anel porfirínico. Esses resultados estão em acordo com as eficiências quânticas de fluorescência, mostrando que os íons metálicos tendem a aumentar a relaxação não radiativa, propriedade que pode ser usada como aliado da termoterapia dinâmica.

Palavras-chave: Porfirina. Espectroscopia. Óptica linear.

Referências:

1 KOU, J.; DOU, D.; YANG, L. Porphyrin photosensitizers in photodynamic therapy and its applications. **Oncotarget**, v. 8, n. 46, p. 81591–81603, 2017. 2 HOLLAS, J. M. **Modern spectroscopy**. 4th ed. Chichester : J. Wiley, 2004. 3 BROUWER, A. M. Standards for photoluminescence quantum yield

measurements in solution (IUPAC Technical Report). **Pure and Applied Chemistry**, v. 83, n. 12, p. 2213–2228, 2011.

52

IC17
Autolesão sob a perspectiva dos profissionais da educação

SOUZA, Y. T.[1]; FONTANARI, J. F.[1]
yaratorres@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Ambiente em que os jovens passam a maior parte do tempo, a escola é um dos principais agentes socializadores e tem posição privilegiada para o desenvolvimento de habilidades socioemocionais. O professor adota a posição de conselheiro, para assuntos que vão além do conteúdo previsto no currículo. Ele é também a principal ponte para detecção e encaminhamento de algo que não vai bem, como em casos de violência infantil. Um acontecimento comum à carreira docente é o encontro com casos em que os alunos apresentam um padrão de cicatrizes horizontais nos braços. O comportamento é denominado autolesão não suicida (ALNS), e é objeto de muitas dúvidas e inseguranças. Considera-se ALNS quando um indivíduo, por cinco ou mais dias, auto inflige danos superficiais em seu corpo, induzindo sangramento, contusão ou dor através de cortes, queimaduras, pancadas, etc. Destaca-se que o objetivo dessa lesão é o dano físico menor e não o suicídio. Entretanto, os riscos desse comportamento são muitos, como a contração de doenças pelo uso de objetos cortantes contaminados e também a diminuição da resistência à dor, que pode levar a lesões severas. (1) No Brasil os dados não são precisos, porém estudos apontam que as ações tomadas ou não por profissionais da educação frente à ALNS são enviesadas e podem ser prejudiciais (2): "A adolescência ainda é vista como uma fase complexa e de difícil manejo, e a ALNS emerge nesse contexto como passageira e busca por atenção, reforçada pela banalização e pelo efeito contágio." É consenso a necessidade emergencial de melhora na orientação aos profissionais da educação, além de novas pesquisas sobre o comportamento autolesivo. Nosso trabalho tem como objetivo sintetizar as informações existentes para auxiliar a equipe educadora a familiarizar-se com os fatores de risco, sinais, seus deveres e limites.

Palavras-chave: Automutilação. Autolesão-não-suicida. Escola. Professor. Adolescente.

Referências:

1 AMERICAN PSYCHIATRIC ASSOCIATION. **Manual diagnóstico e estatístico de transtornos mentais**: DSM-5. 5. ed. Porto Alegre: Artmed, 2014.
2 GABRIEL, I. M. *et al.* Autolesão não suicida entre adolescentes: significados para profissionais da educação e da Atenção Básica à Saúde. **Escola Anna Nery**, v. 24, n. 4, p. e20200050-1-e20200050-9, 2020.

53

IC18

Aplicação e estudo de lentes de Moiré para o transporte de átomos

AGOSTINHO, E. T.[1]; MARTINEZ, V. J.[1]; HENN, E.[1]

ratixe.br@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Dentro do contexto de átomos frios é cada vez mais comum o processo de transportar a nuvem ultrafria de uma câmara para outra contígua a fim de implementar-se técnicas mais refinadas de manipulação e diagnóstico. Para isso, ao longo do tempo foi-se desenvolvendo diversas maneiras de deslocar a posição de uma nuvem atômica. Recentemente, uma nova técnica para o transporte de átomos foi reportada utilizando lentes de Moiré. (1) Unnikrishnan e colaboradores (1) alcançaram uma eficiência de 70% ao deslocar a nuvem atômica 232,5mm de sua posição inicial com mudança de temperatura negligenciável à 11 μK. Existe uma escassez de estudos sobre as Lentes de Moiré no meio acadêmico, apesar de já serem produzidas comercialmente. Por conta disso, há muito o que se explorar na direção de lentes difrativas, limitações e otimização, assim como a utilização dessas lentes para o transporte de átomos. As lentes de Moiré consistem em dois elementos ópticos difrativos (EOD) que possuem um padrão de fase impresso em sua superfície. Esse padrão de fase é criado de tal forma que a luz que passa pelos dois EOD é focalizada num certo ponto, e este ponto focal é deslocado quando um EOD é rotacionado em relação ao outro. Na verdade, os dois EOD agem como uma só lente refrativa que têm a capacidade de deslocar seu ponto focal. Durante o projeto, reproduzimos os cálculos de Bernet, Harm e Ritsch-Marte (2), e encontramos a expressão que dita o ponto focal devido ao padrão de fase impresso nas lentes e sua relação com o ângulo de rotação entre as lentes. Investigamos a eficiência da difração como função do padrão de fase dos EOD. Como é uma lente difrativa, no ponto focal não há somente interferência construtiva, mas encontramos o melhor padrão de fase para que a potência que entra nas lentes seja praticamente a mesma potência do foco. Investigamos ainda a limitação na amplitude de variação da posição do ponto focal como função da resolução com a qual o padrão difrativo é impresso nos EOD. (3) Juntamente com essa condição, calculamos também o valor máximo para o tamanho dos pixels da lente. Se o pixel tiver um tamanho excedente do calculado é possível observar a perda de resolução do foco, com o aparecimento de aberração esférica. O objetivo deste trabalho é avaliar sistematicamente todos os aspectos dessas lentes para o melhor enquadramento em nosso sistema, onde queremos aprisionar átomos de Disprósio no foco do feixe focalizado pelas lentes de Moiré para deslocar a nuvem atômica uma distância na ordem de 40 cm.

Palavras-chave: Lentes de Moiré. Lentes difrativas. Transporte de átomos.

Referências:

1 UNNIKRISHNAN, G. *et al.* Long distance optical transport of ultracold atoms: a compact setup using a Moiré lens. **Review of Scientific Instruments**, v. 92, n. 6, p. 063205-1-063205-4, Mar. 2021.
2 BERNET, S.; HARM, W.; RITSCH-MARTE, M. Demonstration of focus-tunable diffractive Moiré-lenses. **Optics Express**, v. 21, n. 6, p. 6955-6966, Mar. 2013.
3 BERNET, S.; RITSCH-MARTE, M. Adjustable refractive power from diffractive moiré elements. **Applied Optics**, v. 47, n. 21, p. 3722-3730, July 2008.

IC19
Espectroscopia de um feixe atômico de Disprósio

OLIVEIRA, J. P. R.[1]; HENN, E.[1]
10716981@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Meu projeto consiste na realização de um tipo específico de espectroscopia para contribuir para um experimento maior, o aprisionamento de átomos de Disprósio em um MOT. No início deste experimento os átomos de Disprósio são ejetados de um forno em um feixe atômico a temperaturas da ordem de milhares de Kelvins. Para resfria-lo, inicialmente, é utilizado uma técnica conhecida como desaceleração *Zeeman* (1), onde utilizamos um laser a uma frequência que possa levar o átomo de Disprósio a um de seus estados excitados. Entretanto, existe um número finito de frequências do laser que são capazes de realizar tal feito. Por esse motivo, para um bom funcionamento do experimento é necessário fazer um ajuste fino da frequência do laser, para garantir que ele está interagindo corretamente com o feixe atômico. Para resolver este problema, basta realizar uma espectroscopia que consiga anular o efeito Doppler. O efeito Doppler, em resumo, fala sobre a mudança na frequência de uma onda quando o observador ou o emissor está se movendo. Para o nosso caso em específico devido a velocidade dos átomos de Disprósio a frequência do laser enxergada por eles nem sempre é a mesma que a emitida, por esse motivo qualquer resultado de obtivermos por uma espectroscopia simples será inconclusivo. Prova disso é o fato da largura a meia altura da transição considerando os átomos inicialmente a 1500K ser aproximadamente 24 vezes maior que a transição natural. (2) O método que utilizamos para tratar deste problema é a espectroscopia por absorção saturada, também conhecida como *Doppler free* (3), que é capaz de anular os efeitos do alargamento Doppler no resultado. A técnica consiste em utilizar um segundo feixe de luz, de nome *probe*. O feixe terá a mesma frequência, porém com propagação oposta um em relação ao primeiro, chamado *pump*, de modo que os dois feixes se cruzam em um ponto. Com essa conformação, sabemos que os o feixe principal *pump* irá interagir com os átomos cujo deslocamento Doppler causado pela velocidade v_i faça com que o átomo enxergue o laser com uma frequência que possa levá-lo a um estado excitado, o feixe *probe* faz o mesmo porém, como se propaga no sentido contrário de *pump*, interage com os átomos cuja velocidade inicial seja $-v_i$. Sabendo disso podemos concluir que se $v_i = -v_i$ então a velocidade nessa direção é igual a 0. Sendo assim a frequência com que esses átomos estão sendo excitados é a frequência natural da transição, sem alargamento Doppler. O projeto se resume basicamente ao estudo e implementação dessa técnica, nos meses iniciais foi desenvolvido um estudo teórico, que buscava compreender o funcionamento básico dessa técnica, para que fosse viável a aplicação prática posteriormente. Devido ao prolongamento da pandemia não conseguimos desenvolver a parte prática do projeto, e com os resultados teóricos básicos em mãos a ideia é aprofundar ainda mais os estudos na interação luz matéria, para assim que possível coletar os dados experimentais.

Palavras-chave: Espectroscopia. *Doppler free*. Disprósio.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L. **Técnicas de resfriamento e aprisionamento de átomos aplicadas a átomos de estrôncio**. 2013. 117 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

2 SCHMITT, M. *et al*. Spectroscopy of a narrow-line optical pumping transition in atomic dysprosium. **Optics Letters**, v. 38, n. 5, p. 637-639, 2013.
3 RIEGER, T.; VOLZ, T. **Doppler-free saturation spectroscopy**. Garching: Max-Planck-Institute für Quantenoptik. Disponível em: https://www.ph.tum.de/academics/org/labs/fopra/docs/userguide-05.en.pdf. Acesso em: 15 jun. 2021.

56

IC20

Infecção por SARS-CoV-2 em pacientes com faringotonsilite aguda inclusos em protocolo de tratamento com terapia fotodinâmica

GRANDIN FILHO, P. G.[1]; BLANCO, K.[2]

pedrogimenesfilho@gmail.com

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

A pandemia de COVID-19 foi decretada pela OMS e atingiu até o momento a marca de mais de 170 milhões de casos confirmados no mundo. O vírus SARS-CoV-2, da família Coronaviridae, tem capacidade de invasão celular através da enzima conversora de angiotensina 2 altamente expressa na boca e na língua, facilitando a entrada viral no hospedeiro. Na vigência de pandemia por COVID-19, é possível que o SARS-CoV-2 passe a ser agente etiológico importante de faringotonsilites agudas. Como o grupo de estudo foi surpreendido pela pandemia durante projeto de pesquisa que avalia o uso de Terapia fotodinâmica no tratamento de faringotonsilites, projeto iniciado em maio de 2019, é possível que dentre os pacientes avaliados durante o ensaio eventualmente haja pessoas acometidas por SARS-CoV-2. A terapia fotodinâmica (TFD) tem sido avaliada como potencial agente no tratamento de infecções, sendo que o projeto de pesquisa em questão procura avaliar sua associação ao tratamento convencional. Trata-se de modalidade terapêutica que se baseia em processos fotoquímicos e fotofísicos para induzir células à morte. Envolve três componentes principais, a luz visível, o fotossensibilizador e o oxigênio molecular. (1) O comprimento de onda da luz visível deve coincidir com o espectro de absorção do fotosensibilizador, levando a estado de excitação que promove a reação com o oxigênio formando espécies reativas de oxigênio. O uso da curcumina, que tem baixa biodisponibilidade, possibilita o uso local, sem ação sistêmica em doenças envolvendo mucosas. O objetivo principal deste estudo é avaliar se houve casos de COVID-19 em adultos com quadro de faringotonsilite aguda avaliados no pronto atendimento da Santa Casa de Misericórdia de São Carlos, no período que antecedeu o primeiro caso confirmado da infecção no município de São Carlos, notificado no dia 18 de março de 2020. Caso se confirme algum caso de infecção por SARS-CoV-2 nessa amostra, pretende-se avaliar a evolução da doença e eventual resposta à TFD. Além disso, será realizada pesquisa para outros agentes virais causadores de faringotonsilites: Epstein Barr Virus (EBV), Coronavirus OC43, Adenovirus humano, Influenza A H1N1, Influenza B, Herpes simplex virus (HSV) e Rinovirus humano. (2) O diagnóstico etiológico possibilitará a mesma avaliação proposta para os possíveis casos de COVID-19 nas amostras positivas para os agentes citados. A pesquisa dos agentes virais ocorrerá por meio de RT-qPCR que será realizada utilizando o sistema StepOne Plus™ (Thermo Fisher Scientific) em placa de 96 poços selada com fita adesiva óptica MicroAmp (Thermo Fisher Scientific). Para que o experimento ocorra é necessária uma padronização das concentrações de cada primer utilizado para a RT-qPCR bem como de outros componentes utilizados. Atualmente, o estudo encontra-se na fase de padronização das reações de RT-qPCR. Estamos realizando experimentos buscando as concentrações ideais de reagentes e temperatura através da análise de curvas de dissociação geradas durante as reações de PCR e testes com controles positivos. Após a padronização realizaremos a análise nas amostras dos 47 pacientes.

Palavras-chave: COVID-19. SARS-CoV-2. Terapia fotodinâmica.

Referências:

1 CASTANO, A. P.; DEMIDOVA, T. N.; HAMBLIN, M. R. Mechanisms in photodynamic therapy: part one -photosensitizers, photochemestry and cellular localization. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 4, n. 1, p. 279-293, 2004. DOI 10.1016/S1572-1000(05)00007-4.
2 HEDIN, K. *et al*. The aetiology of pharyngotonsillitis in adolescentes and adults: *Fusobacterium necrophorum* is commonly found. **Clinical Microbiology and Infection**, v. 21, n. 3, p. 263.e1-263.e7, 2015.

58

IC21

Funcionalização e caracterização de sonda uretral com fotossensibilizador do tipo curcumina: potencial ação fotoantimicrobiana no trato urinário

DUARTE, L. S.[1]; BAGNATO, V. S.[2]; DIAS, L. D.[2]

luanasalgado16@gmail.com

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

As infecções nosocomiais aliadas a resistência bacteriana são um problema de saúde pública global, provacadas pelo uso indiscriminado de antibióticos em diferentes setores econômicos e na saúde. Estas infecções, além de serem uma das principais causas do aumento da estadia em hospitais, aumentam também significativamente os gastos em procedimentos médicos e também apresentam como precursoras de complicações clínicas que podem levar à óbito. (1) Neste contexto, o uso de dispositivos médicos em pacientes hospitalizados está entre os principais causadores das infecções nosocomiais, destacando aqui a sonda uretral, um dos maiores causadores de infecções associadas ao uso de cateter. (2) Buscando uma alternativa aos antibióticos, esforços têm sido direcionados na busca por novas metodologias alternativas para combater o problema, como a aplicação da terapia fotodinâmica antimicrobiana. (3) O presente projeto tem por objetivo otimizar um processo de funcionalização de uma sonda uretral com curcumina (molécula fotossensibilizadora). Inicialmente avaliou-se o solvente mais compatível com a constituição química da sonda e com a molécula fotossensibilizadora. O melhor tempo/temperatura de reação e a melhor concentração de curcumina foram determinados através de experimentos, visando manter a estabilidade estrutural e constitucional da sonda e o atingir o melhor rendimento de funcionalização de curcumina em sua superfície. Caracterizações espectroscópicas e mecânicas da nova sonda funcionalizada com curcumina foram realizadas, buscando garantir que sua estrutura permaneça semelhante ao modelo comercializado após o processo. Resultados demonstraram que a composição (policloreto de vinila (PVC), silicone e plastificante) foi mantida e, através de testes como espectroscopia UV/visível e espectroscopia no infravermelho, comprovou-se a funcionalização do fotossensibilizador curcumina na superfície da sonda. Atualmente estão em andamento testes microbiológicos para a análise de sua eficácia contra *Escherichia coli*.

Agradecimentos: Os autores agradecem a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) (CEPOF 2013/07276-1) e o INCT "Basic Optics and Applied to Life Sciences" (FAPESP 2014/50857-8, CNPq 465360/2014-9). L. S. Duarte agradece ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de Iniciação Científica 138853/2020-7. L. D. Dias agradece a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pela bolsa de pós-doutorado 2019/13569-8.

Palavras-chave: Sonda uretral. Terapia fotodinâmica. Antibacteriano. Infecção nosocomial. Bactérias multirresistentes.

Referências:

1 KHATOON, Z. *et al.* Bacterial biofilm formation on implantable devices and approaches to its treatment and prevention. **Heliyon**, v. 4, n. 12, p. e01067-1-e01067-36, 2018.

2 ANDERSEN, M. J.; FLORES-MIRELES, A. L. Urinary Catheter Coating Modifications: the race against catheter-associated infections. **Coatings**, v. 10, n. 1, p. 23-1-23-25, 2020.
3 DIAS, L. D. *et al*. Curcumin as a photosensitizer: from molecular structure to recent advances in antimicrobial photodynamic therapy. **Journal of Photochemistry and Photobiology C**, v. 45, p. 100384-1-100384-35, Dec. 2020. DOI 10.1016/j.jphotochemrev.2020.100384.

60

IC22

Revisão dos principais avanços no estudo da interação de septinas com membranas

FACIOLI, M. L.[1]; ARAÚJO, A. P. U.[1]

marialaurafacioli@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas pertencentes à família das GTPases e são encontradas em uma variada gama de organismos. Foram descritas pela primeira vez como proteínas envolvidas na citocinese em leveduras, mas atuam também no remodelamento da membrana celular, na fagocitose, na apoptose, entre outras funções. Para exercer essas funções, as septinas interagem entre si formando heterocomplexos que se polimerizam em filamentos. Dadas as características das septinas e suas variadas funções, a interação destas proteínas com a membrana e sua atuação no reconhecimento da curvatura e remodelação desta é clara. Contudo, os mecanismos de tais interações ainda não estão totalmente elucidados. Tendo em vista as diversas publicações sobre essa temática, este trabalho visa realizar uma revisão bibliográfica a fim de identificar os principais avanços nos vários aspectos da interação septinas-membranas. Assim, serão abordados: a necessidade de lipídios específicos para interação (1); a natureza das interações; a percepção e/ou promoção da curvatura da membrana pelas septinas (2); os motivos de septinas envolvidos na interação, como por exemplo domínios polibásicos e hélices anfipáticas. (3) A partir desta pesquisa, espera-se contribuir com uma análise das sequências envolvidas na interação das septinas com membranas, buscando identificar potenciais padrões responsáveis pela interação.

Palavras-chave: Septinas. Membrana. Interação.

Referências:

1 ZHANG, J. *et al*. Phosphatidylinositol polyphosphate binding to the mammalian septin H5 is modulated by GTP. **Current Biology**, v. 9, n. 24, p. 1458-1467, 1999.
2 BEBER, A. *et al*. Membrane reshaping by micrometric curvature sensitive septin filaments. **Nature Communications**, v. 10, p. 420-1-420-12, 2019. DOI 10.1038/s41467-019-08344-5.
3 ZERAIK, A. E. *et al*. Biophysical dissection of schistosome septins: insights into oligomerization and membrane binding. **Biochimie**, v. 131, p. 96-105, 2016. DOI 10.1016/j.biochi.2016.09.014.

IC23

Avaliação in vitro da possibilidade de disseminação da resistência bacteriana aos carbapenêmicos mediada pelo gene blaKPC através de conjugação

CARVALHO, I.[1]; CAMARGO, I. L. B. C.[1]; BORALLI, C. M. S.[1]

iagocarvalho0167@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O problema da resistência microbiana apresentada por bactérias tem se mostrado cada vez mais preocupante nos últimos anos. Órgãos como a Organização Mundial da Saúde vêm alertando e elencando em ordens de prioridades linhagens bacterianas que podem apresentar altos níveis de resistência. Além disso, revistas importantes como The Global Risks Reports, no ramo econômico, evidenciaram o risco social e financeiro que estas bactérias apresentam. Hoje em dia, bactérias possuem resistência até mesmo aos antibióticos "último recurso", como os carbapenêmicos. (1) As enzimas hidrolíticas carbapenemases ganham destaque nos casos de resistência aos carbapenêmicos, pois são capazes de romper o anel β-lactâmico do antibiótico que deveriam se ligar às *penicillin-binding protein* (PBP´s) para inibir a síntese da parede celular. A principal carbapenemase no Brasil é codificada pelo gene *bla*KPC, presente majoritariamente em plasmídeos contendo transposons, dentre os quais o Tn4401 é mais comum. Mais recentemente, *bla*KPC tem sido descrito em Non-Tn4401 Element (NTEKPC), como o Tn1721. Os transposons são carreados por plasmídeos que podem ou não ser conjugativos. (2-3) A quantificação da frequência de conjugação *in vitro* desses elementos genéticos móveis (EGM) pode revelar a capacidade de transmissão destes genes de resistência entre as bactérias da mesma ou outras espécies. Nosso objetivo neste projeto foi verificar se plasmídeos contendo *bla*KPC conseguem conjugá-los entre bactérias de diferentes linhagens ou espécies com a mesma frequência de conjugação ou não através da determinação da taxa de conjugação entre diferentes espécies ou entre si, realizando ensaios de PCR para a confirmação da conjugação do plasmídeo envolvendo o gene *bla*KPC. Diferentes espécies bacterianas contendo o gene *bla*KPC conseguiram conjugar seus EGM em frequências de conjugação passíveis de serem mensuradas para *K. pneumoniae*. Nosso estudo mostrou uma grande diferença na frequência de conjugação entre diferentes linhagens ou espécies bacterianas variando de (5,7 x 10-7 a 6,3 x10-1). Enquanto que para algumas linhagens não foi possível determinar a taxa de conjugação, a linhagem de *E. coli* J53_pAMKP10 apresentou uma frequência de conjugação próximo a 6,3 x 10-1 quando submetida a ensaios junto a *K. pneumoniae* AMKP36. Nossos estudos ainda precisam ser continuados para avaliar, em seguida, se um plasmídeo vindo de uma espécie para *E. coli* com uma baixa frequência de conjugação, por exemplo, conjuga desta *E. coli* para uma bactéria da mesma espécie que sua doadora inicial com a mesma frequência. As tendências de conjugação destes genes em EGM para as diferentes espécies bacterianas revelam que o par plasmídeo + célula hospedeira exerce um papel importante na capacidade e modo de disseminação da resistência em bactérias que causam IRAS.

Palavras-chave: blaKPC. Resistência antimicrobiana. Conjugação.

Referências:

1 DHINGRA, S. *et al*. Microbial resistance movements: an overview of global public health: threats posed by antimicrobial resistance, and how best to counter. **Frontiers in Public Health**, v. 8, p.

535668-1-535668-22, Nov. 2020. DOI 10.3389/fpubh.2020.535668.
2 FROST, L. S. *et al*. Mobile genetic elements: the agents of open source evolution. **Nature Reviews Microbiology**, v. 3, n. 9, p. 722-732, Sept. 2005.
3 EL-GAMAL, M. I. *et al*. Recent updates of carbapenem antibiotics. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v. 131, p. 185-195, May 2017. DOI 10.1016/j.ejmech.2017.03.022.

63

IC24

Estudo da interação da melanina com o ultrassom de baixa intensidade

SOUZA, M. O.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]

murilodeoliveira8@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A melanina é um pigmento natural encontrado na maioria dos organismos, sendo o principal responsável pelas diferentes tonalidades de cabelos e peles, com a principal função de proteger o DNA contra a ação nociva da radiação solar. A melanina é um absorvente de luz eficaz, sendo capaz de dissipar mais de 99,9% da radiação UV absorvida. Por conta dessa propriedade, acredita-se que a melanina seja capaz de proteger as células da pele dos danos da radiação UV, reduzindo o risco de degradação dérmica, e câncer de pele. Em casos em que o efeito fotoprotetor da melanina não é suficiente, podem se desenvolver danos na pele que culminam em câncer. A terapia fotodinâmica (TFD) é uma abordagem bem-sucedida no tratamento de lesões pré-cancerosas e câncer de pele não melanoma, com resultados cosméticos excelentes. (1) No entanto, uma limitação da TFD é a limitada penetração da luz visível no tecido biológico, conseguindo atingir 1 cm de profundidade no corpo de forma não invasiva (sem o uso de fibras óticas). Este fato é devido à presença da melanina a qual é um agente absorvedor e espalhador da luz, além de apresentar efeito antioxidante. Neste sentido, uma terapia promissora não invasiva que vem se estudando para o tratamento de lesões de pele pigmentadas ou de maior espessura é a terapia sonodinâmica (TSD). A TSD se baseia nos efeitos sinérgicos do ultrassom de baixa intensidade e uma droga sonoativa chamada de sonosensibilizador (SS). A TSD usa como fonte excitadora ao ultrassom que, ao contrário da luz, é uma onda mecânica que tem excelente penetração nos tecidos biológicos, o que permite a interação do ultrassom com o SS em camadas mais profundas gerando efeitos sonomecânicos (e.g., geração de forças mecânicas) e sonoquímicos (e.g., geração de ROS), os quais induzem a morte celular. (2) Com o intuito de ajudar na compreensão dos efeitos sonodinâmicos sobre tumores pigmentados durante a TSD, esse projeto tem como objetivo estudar as alterações das propriedades ópticas da melanina durante a interação com o ultrassom terapêutico, podendo ao final desta pesquisa, relacionar essas alterações com a mudança da concentração da melanina e dos parâmetros do ultrassom.

Palavras-chave: Melanina. Ultrassom. Terapia sonodinâmica. Propriedades ópticas.

Referências:

1 RENGRENG, L. *et al.* Sonodynamic therapy, a treatment developing from photodynamic therapy. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 19, p. 159-166, Sept. 2017. DOI 10.1016/j.pdpdt.2017.06.003.

2 ROSENTHAL, I.; SOSTARIC, J. Z.; RIESZ, P. Sonodynamic therapy: a review of the synergistic effects of drugs and ultrasound. **Ultrasonics Sonochemistry**, v. 11, n. 6, p. 349-363, Sept. 2004. DOI 10.1016/j.ultsonch.2004.03.004.

IC25

Síntese e caracterização de grafeno induzido por um laser de CO2 utilizando materiais poliméricos comerciais

SILVA, P. A.[1]; MASTELARO, V. R.[2]; KOMORIZONO, A. A.[2]

pedro.alm.silva@usp.br

[1]Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

O grafeno é um material bidimensional (2D) composto de uma única camada de átomos de carbono com hibridização sp2 formando uma rede hexagonal. Devido às suas excelentes propriedades tais como alta mobilidade de carga (2 x 105 cm2/Vs), módulo de elasticidade de 1 TPa e elevada condutividade térmica (5300 W/mK), o grafeno é um material potencial para aplicação em células solares, transistores, sensores de gás, etc. (1) Métodos de preparação convencional do grafeno foram por muito tempo um limitante na fabricação desse material por demandar muito tempo e necessitar de equipamento especializado. Dessa forma, o grafeno induzido por laser (LIG) trata-se de um método mais prático e menos custoso. O LIG atua por meio da aplicação de um laser de CO2 formando grafeno poroso (3D) a partir de materiais poliméricos como precursores de carbono. A irradiação da fonte de carbono com o laser é responsável por converter fototermicamente o carbono em um carbono hibridizado sp2. Parâmetros como velocidade de varredura e potência do laser são fundamentais para a formação de LIG. (2) Este trabalho tem como objetivo obter LIG por meio de um laser infravermelho de CO2 com comprimento de onda 10,6 µm e analisar sua microestrutura e propriedades tendo como substrato a poliimida (PI) e a imida de poliamida (PAI). O LIG foi obtido pela exposição de um substrato de poliimida a um laser de CO2 variando o patamar (voltagem) do laser. O patamar foi variado de 1,2 V e 1,3 V e a intensidade do laser utilizado foi de 5% da potência máxima do laser (350 W). Medidas de Raman mostram que o material obtido apresenta o espectro característico de materiais a base de carbono com as principais bandas, D, G e 2D. Comparando-se com os dados disponíveis na literatura para o LIG no PI (3), a posição das bandas coincide, porém é visto que há uma discrepância com a intensidade dos picos. Para a amostra de PI analisada, pode-se observar que o pico D é maior e os picos G e 2D são consideravelmente menores. Visto que o pico D indica a presença de defeitos, podemos notar que a amostra apresenta em sua estrutura então uma maior quantidade de defeitos e influência de ligações sp3, muito provavelmente devido a presença de grupos funcionais oxigenados. A menor presença do pico G indica uma menor quantidade de ligações sp2, que caracterizam o grafeno, indicando novamente que não houve formação do LIG. Medidas de XPS mostram a presença dos elementos carbono, oxigênio e nitrogênio em ambas as amostras e que não houve uma variação significativa na concentração de cada elemento do LIG com patamar 1,2 e 1,3 V. Além disso, para ambos os patamares, existe uma grande contribuição dos grupos funcionais oxigenados na forma das seguintes ligações COOH, C=O e C-O, indicando que não houve a transformação completa em LIG. Dessa forma, conclui-se a necessidade de se investigar os parâmetros de potência do laser e velocidade de varredura para obter a grafenização desejada.

Palavras-chave: Grafeno induzido por laser. Laser de CO2. Poliimida (PI).

Referências:

1 BOLOTIN, K. I.; *et al.* Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. **Solid State Communi-**

cations, v. 146, n. 9-10, p. 351-355, June 2008.
2 WANG, W. *et al*. Tailoring the surface morphology and nanoparticle distribution of laser-induced graphene/Co3O4 for high-performance flexible microsupercapacitors. **Applied Surface Science**, v. 504, p. 144487-1-144487-10, Feb. 2020. DOI 10.1016/j.apsusc.2019.144487.
3 STANFORD, M. G. *et al*. Laser-induced graphene triboelectric nanogenerators. **ACS Nano**, v. 13, n. 6, p. 7166-7174, June 2019. DOI 10.1021/acsnano.9b02596.

66

IC26

A complexidade das espécies e a arquitetura de genes que codificam proteínas em eucariotos

REIS, R.[1]; KOIDE, T.[2]

renandosreiss@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

Em eucariotos, os genes codificadores de proteínas possuem as sequências de nucleotídeos que codificam a informação para a síntese proteica, chamadas de éxons, intercaladas por sequências não codificantes, chamadas de íntrons, que são excluídas do mRNA pelo processo de *splicing*. (1) Essa característica adiciona um nível de complexidade extra para os genes de eucariotos, que terão uma organização interna de éxons e íntrons chamada de arquitetura do gene. (2) Estudos de genomas de fungos e metazoários apontam que algumas das características da arquitetura de genes, como alta quantidade de íntrons e alta densidade desses íntrons em pré-mRNAs, estão relacionadas com o aumento de complexidade da espécie em termos de celularidade (1-3) e, para alguns fungos, com o aumento da virulência. (3) No entanto, estes estudos tendem a ignorar espécies de protozoários. Por isso, este trabalho examina a relação entre complexidade e estilo de vida com a arquitetura de genes que codificam proteínas em 29 espécies de eucariotos, distribuídas nos clados *Metazoa*, *Fungi*, e nos clados de protistas *Amoebozoa* e *Discoba*. Foram identificadas diferentes relações entre aumento de complexidade dos organismos e características da arquitetura de genes. O aumento de celularidade das espécies é acompanhado pelo aumento de pré-mRNAs com íntrons, de quantidade de íntrons nesses pré-mRNAs e de espaço ocupado pelos íntrons nos transcritos. Particularmente em fungos, é observado que esses parâmetros também dividem os organismos em termos de estilo de vida, misturando espécies multicelulares com espécies de parasitas facultativos. Isso é visto em menor escala no gênero *Naegleria*, protozoários do clado *Discoba*, que possui espécies de vida-livre e uma espécie que pode ser parasita em humanos. Os resultados do trabalho indicam que tanto a multicelularidade quanto o estilo de vida de parasitas facultativos são diferentes expressões de complexidade relacionadas com a evolução da arquitetura dos genes nos clados de eucariotos.

Palavras-chave: Genética. Evolução molecular. Arquitetura de genes. Complexidade de eucariotos. Parasitismo.

Referências:

1 ROGOZIN, I. B. *et al*. Origin and evolution of spliceosomal introns. **Biology Direct**, v. 7, p. 11-1-11-28, 2012. DOI 10.1186/1745-6150-7-11.

2 LYNCH, M. **The origins of genome architecture**. Sunderland, MA: Sinauer Associates, 2007.

3 GRÜTZMANN, K. *et al*. Fungal alternative splicing is associated with multicellular complexity and virulence: a genome-wide multi-species study. **DNA Research**, v. 21, n. 1, p. 27-39, 2014. DOI 10.1093/dnares/dst038.

67

IC27
Conservação e evolução de sítios de splicing

REIS, R.[1]; KOIDE, T.[2]
renandosreiss@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

Íntrons spliceossomais são sequências de nucleotídeos que interrompem genes de eucariotos. Eles são removidos do pré-mRNA pela ação de uma complexa maquinaria molecular chamada de spliceossomo, em um processo chamado de *splicing*. (1) Para o início do *splicing* o spliceossomo deve reconhecer dois sítios presentas nas fronteiras dos íntrons, os sítios de *splice* 5′ (5′ss) e 3′ (3′ss). (1) No entanto, estes reconhecimentos não são tarefas simples para o spliceossomo, o qual deve diferenciar sítios falsos dos reais, que tendem a ser degenerados. (1-3) Muito do que se sabe sobre esses sítios foi obtido por pesquisas em plantas, fungos e animais, porém questões como as suas origens, estruturas fundamentais e evoluções exigem estudos mais amplos, incluindo espécies dos mais variados ramos filogenéticos dos eucariotos. (2,3) Neste trabalho, os sítios 5′ss e 3′ss dos íntrons de 29 espécies de clados de metazoários, fungos e protozoários foram estudados via análises de conteúdo de informação de sinais biológicos (calculado via entropia Shannon) e análises de motivos consenso. (2-3) Os resultados mostram uma forte correlação negativa entre o conteúdo de informação do sítio 5′ss e a quantidade de íntrons no genoma. Além disso, se observa alta conservação entre as espécies tanto das sequências consenso dos sítios quanto dos motivos mais frequentes encontrados neles, mostrando que a sua conservação atinge não só o padrão global de reconhecimento, mas também padrões específicos espalhados nos íntrons. Por fim, também foi possível identificar como esses sítios se adaptam a fatores estruturais dos íntrons em que residem, como tamanho e conteúdo GC. Esses resultados em conjunto com a literatura apontam para uma evolução muito maleável de sítios de *splicing* por toda a história evolutiva dos eucariotos, dirigida, entre outros fatores, pela quantidade de íntrons nos organismos, pelas características desses íntrons e por mutações no spliceossomo. (2-3)

Palavras-chave: Genética. Evolução molecular. Íntrons. Splicing. Sítios de splicing.

Referências:

1 KOONIN, E. V.; CSUROS, M.; ROGOZIN, I. B. Whence genes in pieces: reconstruction of the exon-intron gene structures of the last eukaryotic common ancestor and other ancestral eukaryotes. **WIREs RNA**, v. 4, n. 1, p. 93-105, 2013. DOI 10.1002/wrna.1143.
2 IRIMIA, M.; PENNY, D.; ROY, S. W. Coevolution of genomic intron number and splice sites. **Trends in Genetics**, v. 23, n. 7, p. 321-325, 2007. DOI 10.1016/j.tig.2007.04.001.
3 SCHWARTZ, S. *et al*. Large-scale comparative analysis of splicing signals and their corresponding splicing factors in eukaryotes. **Genome Research**, v. 18, p. 88-103, Nov. 2007. DOI 10.1101/gr.6818908.

68

IC28

DFT investigation of the stability mechanisms of 8-atom binary clusters using machine learning

MORAIS, F. O.[1]; SILVA, J. L. F.[2]; ANDRIANI, K. F.[2]

felipeom@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Química de São Carlos - USP

Atomic clusters play a key role in nanoscience due to their unique properties that vary substantially with size, charge state, and composition. Particularly in the nanoscale regime, quantum-size effects can be promising for several applications in catalysis, such as methane dehydrogenation. (1) Those properties can be tuned by alloying two or more chemical species, nonetheless, there is a lack of efficient designing strategies from the theoretical area. In this study we propose a new methodology to understand the stability mechanisms of binary clusters using density functional theory calculations (DFT-PBE) and non-supervised machine learning. This methodology was employed to investigate AnB8-n binary clusters, where A, B = Fe, Co, Ni, Cu, Ga, Al, and n = 0, 2, 4, 6, and 8. To reach this goal, the generation of alloys was done from enumeration of homotops based on the unary clusters' geometries from previous studies (2) combined with a *k-means* clustering algorithm approach, enabling the performance of DFT calculations for only 2% of the possible homotops. (3) Moreover, from a Spearman Correlation analysis within our results were unveiled the properties that lead to the lowest energy configuration for each system, i.e., the stability mechanisms. Thus, this work contributes to the development of new functional materials and allows a similar procedure to be extended for other sizes and compositions.

Palavras-chave: Binary clusters. DFT-PBE. K-means clustering algorithm.

Referências:

1 ANDRIANI, K. F.; MUCELINI, J.; DA SILVA, J. L. F. Methane dehydrogenation on 3d 13-atom transition-metal clusters: A density functional theory investigation combined with Spearman rank correlation analysis. **Fuel**, v. 275, p. 117790-1-117790-13, Sept. 2020. DOI: 10.1016/j.fuel.2020.117790.
2 CHAVES, A. S.; PIOTROWSKI, M. J.; DA SILVA, J. L. F. Evolution of the structural, energetic, and electronic properties of the 3d, 4d, and 5d transition-metal clusters (30 TMn systems for n= 2–15): a density functional theory investigation. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 19, n. 23, p. 15484-15502, June 2017. DOI: 10.1039/C7CP02240A.
3 MORAIS, F. O.; ANDRIANI, K. F., DA SILVA, J. L. F. Investigation of the stability mechanisms of 8-atom binary metal clusters using DFT calculations and k-means clustering algorithm. **Journal of Chemical Information and Modeling**, June 2021. No prelo. DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00253.

IC29

Estudos de toxicidade de nanorods para aplicações em nanomedicina

PEREIRA, J. A.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]; LINS, P. M. P.[1]

joyce.alves.pereira@hotmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A nanotecnologia pode ser aplicada em diversas áreas, incluindo a medicina, área denominada nanomedicina. O objetivo dessa área é o aperfeiçoamento de tratamentos existentes e desenvolvimento de novas terapias por meio dos nanomateriais. No entanto, a toxicologia e seus efeitos adversos em sistemas biológicos ainda não se encontram elucidados, o que impede a translação desses novos materiais para as clínicas. (1) Os nanorods de ouro (AuNR) são destaque na área de nanopartículas plasmônicas devido à sua assimetria caracterizada pela presença de duas bandas plasmônicas, possibilitando o desenvolvimento de um nanomaterial com absorção eletrônica na região do infravermelho para aplicação na terapia fototérmica. (2) Esse projeto tem como finalidade analisar a toxicidade de nanorods de ouro através de estudos in vitro utilizando três linhagens celulares diferentes, sendo elas: células saudáveis de fibroblastos (L929), células de tumor de mama metastático (4T1) e macrófago (RAW 264.7). Os estudos podem colaborar com a nanomedicina, através de seu desenvolvimento e de maiores entendimentos sobre a toxicidade dos nanomateriais. (3)

Palavras-chave: Nanomedicina. Nanorods. Nanotoxicologia.

Referências:

1 BOULAIZ, H. *et al.* Nanomedicine: application areas and development prospects. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 12, n. 5, p. 3303-3321, 2011.
2 HUANG, X.; JAIN, P. K.; EL-SAYED, I. H. Plasmonic photothermal therapy (PPTT) using gold nanoparticles. **Lasers in Medical Science**, v. 23, n. 3, p. 217-228, 2008.
3 JIN, N.; ZHANG, Q.; YANG, M. ; YANG, M. Detoxification and functionalization of gold nanorods with organic polymers and their applications in cancer photothermal therapy. **Microscopy Research and Technique**, v. 82, n. 6, p. 670-679, 2018.

70

IC30

Simulações computacionais para melhor compreensão da distribuição espacial de matéria escura

TOMÉ, F. A.[1]; SOUZA, V.[2]

tomefelipe0@usp.br

[1]EESC/ICMC - USP

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde o ínicio da cosmologia observacional são constatados problemas evidentes na cinemática de grandes estruturas de matéria dispersas pelo cosmos, tornando necessária a formulação teórica de uma partícula estável e não-bariônica (1) que, apesar de constituir a maior parte do universo segundo apontamentos algébricos (2), não interage eletromagneticamente. A possível existência destas partículas já é bem aceita e difundida, assim como hipóteses e análises sobre sua conformação espacial e perfis de densidade (3) devido à excentricidade de suas interações. Destarte, esta pesquisa tem como objetivo aproximar relações elementares entre a partícula supracitada e partículas bariônicas, inferindo sobre estas aproximações a conformação espacial de aglomerados de matéria por meio de métodos computacionais e numéricos, além de discutir alguns perfis teóricos e resultados de simulações a fim de analisar propriedades específicas como aniquilação ou acoplamento de matéria escura. A metodologia é composta de induções finitas como o polinômio de Taylor em intervalos de tempo variáveis proporcionais às acelerações do sistema, possibilitando a construção de um algoritmo de simulação válido, apurado e otimizado.

Palavras-chave: Matéria escura. Análise de dados. Simulações. Perfis de densidade.

Referências:

1 SWART, J. de; BERTONE, G.; VAND DONGEN, J. How dark matter came to matter. **Nature Astronomy**, v. 1, n. 3, p. 0059-1-0059-8, 2007.
2 KAPLINGHAT, M.; TURNER, M. S. Precision cosmology and the density of baryons in the universe. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 3, p. 385-388, 2001.
3 NAVARRO, J. F.; FRENK, C. S.; WHITE, S. D. M. **The structure of cold dark matter halos**. 1995. Disponível em: https://arxiv.org/abs/astro-ph/9508025. Acesso em: 17 jun. 2021.

71

IC31
Simulando sinal de ressonância magnética com FPGA

SANTOS, C.[1]
caroline_maria@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A ressonância magnética consiste na aplicação de um campo magnético externo na amostra que se deseja analisar. Esse campo interage com o momento angular (Spin) e momento magnético dos átomos, causando uma precessão desses momentos. Essa precessão gera um sinal característico de cada amostra, chamado sinal de indução livre (SIL), ou equivalentemente, *free induction decay* (FID). (1) O objetivo desse projeto é implementar um programa na FPGA que simula esse sinal FID. Isso está sendo feito usando a FPGA cyclone IV E e a linguagem de descrição de hardware VHDL. O sinal gerado pela FPGA é discretizado, por isso ele é enviado a uma placa conversora digital-analógico, a THDB-ADA, que o transformará em um sinal contínuo, que poderá ser exibido num osciloscópio. No projeto, o sinal FID está sendo representado como uma SINC. Estão sendo geradas várias SINCs, e é possível alterar a amplitude de cada uma, de forma a conseguir um desenho senoidal, triangular, ascendente ou descendente. Além de ser possível adicionar ruídos ao sinal.

Palavras-chave: Ressonância magnética. FPGA. VHDL.

Referências:

1 MARTINS, M. J. **Desenvolvimento de um tomógrafo de ressonância magnética**: integração e otimização. 1995. 78 p. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1995.

72

IC32

Reconstrução de modelos radiativos de fontes de raios gama na região do centro galáctico

MOMESSO, D. C.[1]; VIANA, A.[1]

daniel.cecchin@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Dentre todos os ambientes de alta energia de nossa Galáxia, a região do Centro Galáctico é definitivamente a mais rica. Ela abriga uma grande quantidade de emissores de altas energias, incluindo o buraco negro supermassivo mais próximo de nós, um Pevatron cósmico, nuvens moleculares densas, forte atividade de formação de estrelas, múltiplos remanescentes de supernova e nebulosas de vento de pulsar, estruturas de rádio em forma de arco, bem como a base do que podem ser grandes "outflows"galácticos em grande escala. (1) Neste cenário a fonte de raios gama mais brilhante nesta região é a sua fonte central, chamada HESS J1745-290. No entanto, sua origem ainda é desconhecida. É posicionalmente compatível com o buraco negro supermassivo Sagittarius A$*$. No entanto, uma nebulosa de vento de pulsar de fundo nas proximidades, descoberta por Chandra (2) (e dentro do erro de apontamento do telescópio HESS), torna difícil dizer se a emissão que vemos está relacionada à acumulação de buracos negros, a um vento prolongado ou mesmo a um pico de aniquilação de matéria escura. A fim de apontar qual a origem dessa emissão, neste projeto, investigamos a possibilidade de que a fonte central de raios gama esteja ligada ao Pevatron descoberto nesta região. Neste cenário, a aceleração estocástica de prótons (até energias PeV) interagindo com o campo magnético turbulento nas proximidades de Sagittarius A$*$ poderia produzir um fluxo de saída de prótons relativísticos que se difundem para fora interagindo com as nuvens moleculares que circunda essa região (3) produzindo o sinal de raios gama observado. Portanto o objetivo final desse projeto é analisar e buscar reconstruir modelos radioativos de interação dos raios cósmicos com as nuvens moleculares que possam nos indicar se tal hipótese que temos é corroborada ou não. A fim de alcançar esse objetivo uma atenção especial será dada ao aprendizado de softwares astronômicos avançados para lidar com dados de raios gama, como Astropy, Gammapy, CTools e bibliotecas numéricas que podem gerar radiação não-térmica de uma população de partículas relativísticas, como Naima ou Gamera. Esses softwares serão usados para analisar dados dos telescópios Fermi-LAT e H.E.S.S. de fontes na região do Centro Galáctico. Modelos radiativos serão ajustados aos espectros de raios gama a fim de recuperar a distribuição primária de energia de raios cósmicos dessa fonte central, o buraco negro Sagittarius A

Palavras-chave: Astrofísica de altas energias. Raios cósmicos. Centro galáctico.

Referências:

1 LONGAIR, M. S. **High energy astrophysics**. 3rd ed. New York: Cambridge University Press, 2011.
2 WANG, Q. D.; LU, F. J.; GOTTHELF, E. V. G359.95-0.04: an energetic pulsar candidate near Sgr A$*$. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v. 367, n. 3, p. 937-944, Apr. 2006. DOI: http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2966.2006.09998.x.
3 FERRIÈRE, K. Interstellar gas within 10 pc of Sagittarius A$*$. **Astronomy and Astrophysics**, v. 540, p. A50-1-A50-21, Apr. 2012. DOI: http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201117181.

73

IC33

Estudo de uma nanoemulsão de porfirina e seu efeito antimicrobiano associado à terapia fotodinâmica no tratamento da pneumonia

TOMÉ, A. J. B.[1]; KASSAB, G.[1]; TOVAR, J. S. D.[1]; JASINEVICIUS, G. O.[1]; INADA, N. M.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; KURACHI, C.[1]; BUZZÁ, H. H.[1]

anajuliabarbosatome@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma técnica amplamente estudada para a eliminação de tumores e de microrganismos. Ela consiste em associar oxigênio molecular, luz em um determinado comprimento de onda e um composto fotossensível que, ao reagirem, formam espécies reativas de oxigênio, citotóxicas, capazes levar as células alvo à morte. Ainda não foi reportado resistência à ela, visto que o metabolismo celular depende do oxigênio para sua manutenção. Portanto, a TFD surge como uma alternativa para os tratamentos usuais, como é o caso do uso de antibióticos para a eliminação das bactérias causadoras de pneumonia (1-2), especialmente porque o uso inadequado vem aumentando a incidência de resistência bacteriana. A fim de potencializar a TFD, a nanotecnologia têm sido vastamente empregada. Neste contexto, estudos antimicrobianos foram realizados com uma nanoemulsão de porfirina que já possui resultados promissores com tumores. (3) Além disso, testes de nebulização foram feitos com esas nanoemulsões para garantir que não haja mudança de suas propriedades, resultando em uma boa molécula para tratamento da pneumonia via inalação. Os parâmetros utilizados para a realização da Terapia Fotodinâmica Antimicrobiana (TFDa) consistiram em variações da dose de luz (15 e 30 J), do tempo de incubação (0, 20 e 60 minutos) e, por fim, da concentração. A depender do patógeno, as concentrações analisadas foram diferentes: no caso da bactéria *S. pneumoniae*, foram estudadas concentrações de 1nM a 200 uM, e para a *S. aureus*, foram testadas concentrações de 1nM a 1000 nM. Os resultados dos experimentos in vitro mostraram que a nanoemulsão empregada têm potencial antimicrobiano em concentrações nanométricas e que não é tóxico quando não há a presença de uma fonte de luz. A interação da nanopartícula com os compostos do ambiente pulmonar é o próximo passo para avaliar a eficácia da nanoemulsão de porfirina no tratamento de pneumonia.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Pneumonia. Nanoemulsão.

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. 2017.
2 KASSAB, G. *et al.* Safety and delivery efficiency of a photodynamic treatment of the lungs using indocyanine green and extracorporeal near infrared illumination. **Journal of Biophotonics**, v. 13, n. 10, p. e202000176-1-e202000176-13, Oct. 2020.
3 HOU, W. *et al.* A nanoemulsion with a porphyrin shell for cancer theranostics. **Angewandte Chemie**, v. 58, n. 42, p. 14974-14978, Oct. 2019.

74

IC34

Ação de gemcitabina e paclitaxel transportado por nanocarreadores lipídicos para modulação de células tumorais e imunocompetentes

QUITIBA, J.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]

jquitiba@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer é uma das doenças crônicas mais recorrentes na população brasileira e mundial. Neste cenário, o carcinoma pancreático humano está entre as neoplasias com maior número de mortes no mundo e a elevada frequência de casos de recidivas e metástases demandam o desenvolvimento de novas propostas terapêuticas para aumentar a atividade dos principais mecanismos efetores da imunidade celular. (1) Como um dos principais fatores que favorece o crescimento e a expansão das células neoplásicas é sua capacidade de modular o microambiente tumoral e evadir-se da imunovigilância, o presente projeto foi formulado para desenvolver nanocarreadores para o transporte de agentes antineoplásicos para o interior de células tumorais e modulação das principais células do sistema imune. (2) Com esse propósito, nanopartículas lipídicas foram sintetizadas com os principais componentes da membrana plasmática da célula tumoral (MNPs) e incorporada com gemcitabina e paclitaxel (drogas de primeira linha utilizada no tratamento clínico), visando o endereçamento dos carreadores para as células tumorais e a entrega de material antigênico a monócitos. Ensaios de apoptose/necrose mostraram que a combinação de GEM e PTX nas MNP-GEM-PTX favorece a atividade citotóxica em células neoplásicas de pâncreas. O presente projeto visa contribuir para o desenvolvimento de um nanocarreador para o transporte de agentes imunomoduladores, tanto para o interior de células tumorais, quanto para células imunocompetentes.

Palavras-chave: Nanomedicina. Imunologia. Câncer.

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, 2018.

2 KROLL, A. V.; FANG, R. H.; ZHANG, L. Biointerfacing and applications of cell membrane-coated nanoparticles. **Bioconjugate Chemistry**, v. 28, n. 1, p. 23-32, 2017.

75

IC35

Estudo da formação de corona de mucina em nanopartículas de ouro

MENDES, B.[1]; ZUCOLOTTO, V.[2]; MIZIARA, L.[2]; LINS, P. M. P.[2]

bruno.mendes@estudante.ufscar.br

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

Corona de proteína demonstrou seu bom desempenho em uma série de respostas biológicas em sistemas nanoestruturados, como a absorção no trato intestinal e internalização/transporte por células epiteliais. Mucina é o principal constituinte do muco, um gel que recobre todos as membranas mucosas no corpo humano. Este estudo avalia a interação entre nanopartículas de ouro e mucina, buscando entender o processo de formação da corona proteica. Foi verificada a formação de corona em nanopartículas de ouro com diferentes cargas superficiais, positivas e negativas. A influência de etapas de lavagem e centrifugação também foram analisadas. Os resultados foram comparados com a formação de corona de albumina em nanopartículas de ouro. Espectros de fluorescência e absorbância nas diferentes amostras indicaram a formação de corona de ambas as proteínas nos dois tipos de nanopartículas. As concentrações de proteína nas nanopartículas foram próximas, mesmo após três diferentes etapas de lavagem e centrifugação, sendo elas nas nanopartículas de carga superficial negativa, 0,09 mg.ml-1; 0,073 mg.ml-1 e 0,069 mg.ml-1 para 5, 10 e 15 minutos de centrifugação, respectivamente. Para nanopartículas positivamente carregadas as concentrações foram de 0,123 mg.ml-1, 0,103 mg.ml-1 e 0,092 mg.ml-1 evidenciando a formação de hard corona. (1)

Palavras-chave: Mucina. Albumina. Nanopartícula de ouro. Corona proteica.

Referências:

1 MILANI, S. *et al.* Reversible versus irreversible binding of transferrin to polystyrene nanoparticles: soft and hard corona. **ACS Nano**, v. 6, n. 3, p. 2532-2541, 2012.

IC36

Análise e classificação de plântulas de soja por meio do processamento digital de imagens e de inteligência artificial

SECUNDINO, J. P. A. S.[1]; ODA, Y. S.[2]; CASTRO NETO, J. C.[2]

jp.secundino@usp.br

[1]Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

A cultura de soja desempenha um papel importante na economia nacional, e, por este motivo, é necessária a busca por métodos e tecnologias que tornem a pesquisa no campo de sementes ainda mais eficiente. Pensando nisto, o presente projeto visa, através de métodos de processamento digital de imagens e da aplicação de inteligência artificial, analisar e classificar plântulas de soja. O principal objetivo é auxiliar os pesquisadores nos procedimentos repetitivos e propícios a erros inerentes aos testes de vigor e aos experimentos de germinação, em especial às etapas de medição. Além disso, também deseja-se, com a criação desta ferramenta, diminuir os níveis de subjetividade que estão presentes nestas análises, principalmente na fase de classificação das plântulas. Para isso, este trabalho é dividido entre a criação de uma base com imagens de plântulas de soja e o desenvolvimento de dois módulos, um para a segmentação das imagens das plântulas em suas partes fundamentais e outro para a classificação das mesmas, ambos utilizando técnicas de Visão Computacional. Objetivando a criação da base, os experimentos de germinação foram realizados de acordo com as normas adotadas pela Regra de Análise de Sementes (RAS) (1) e as plântulas resultantes foram fotografadas conforme método semelhante ao descrito por Lima. (2) Esta base de imagens foi processada e está sendo utilizada para o treinamento de modelos de Redes Neurais de segmentação semântica e de classificação de imagens, ambas tarefas importantes para a coleta das informações necessárias para o cálculo do vigor dos lotes de sementes. Até o presente momento, foi desenvolvida uma estrutura para facilitar a coleta de imagens para o banco de dados. Após a sua criação, as imagens de plântulas de três e sete dias de germinação foram coletadas e armazenadas em um banco para serem tratadas e analisadas posteriormente. Com o banco criado, foi possível realizar a segmentação semântica manual das plântulas de soja e pré-processamento de todas as imagens para a criação de um dataset para o treino das redes neurais. Com os dados preparados, deu-se início ao processo de desenvolvimento dos modelos de classificação, os quais já possuem alguns resultados parciais.

Palavras-chave: Redes neurais. Vigor de sementes. Visão computacional.

Referências:

1 BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Secretaria de Defesa Agropecuária. **Regras para análise de sementes**. Brasília: 2009.

2 LIMA, D. C. de. **Avaliação do vigor e germinação de sementes de soja a partir da análise de imagens de plântulas**. 2015. 85 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

77

IC37

Estudos sobre a durabilidade e a estabilidade de biossensores de ouro nanoporoso para aplicação na detecção de dopamina

LARINE, H. M.[1]; GONÇALVES, D.[2]; SUKERI, A.[2]

hmlarine@usp.br

[1]Instituto de Química de São Carlos - USP

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os sensores à base de Au nanoporoso encontram aplicação em diferentes setores, destacando-se as áreas farmacêutica, ambiental e de alimentos, tanto para a quantificação quanto para a detecção de analitos. Uma das características mais importantes do Au nanoporoso é a sua capacidade de mudança da sua superfície de tal forma a se obter uma área de superfície eletroquimicamente funcional com relativa estabilidade (1), favorecendo a adsorção de moléculas, tal como a dopamina (DA). A detecção da DA apresenta algumas dificuldades, tais como efeitos de interferência de outros componentes em amostras biológicas (2) e potenciais de oxidação muito similares em presença de outros analitos (3). Neste trabalho, foram produzidos eletrodos de Au nanoporoso e realizadas diferentes modificações nos eletrodos produzidos. Foram analisadas as superfícies dos eletrodos por métodos eletroquímicos que envolvem a formação e sucessiva redução de óxido de Au em solução de H2SO4, observando as respostas por voltametria cíclica e voltametria de onda quadrada. Observou-se a detecção de DA pelo seu processo de oxidação em diferentes concentrações. Os eletrodos foram preparados utilizando folhas de politereftalato de etileno (PET) e telas de poliéster comerciais, e foi utilizado uma impressora para a fabricação dos moldes dos eletrodos. O estudo utilizou tinta condutora à base de carbono nos eletrodos sobre as telas de poliéster até sua secagem. As modificações nas superfícies dos eletrodos foram realizadas utilizando uma solução precursora de Au (HAuCl4.3H2O) e H2SO4 em proporção 1:4 vol/vol. A eletrodeposição foi realizada pela técnica de cronoamperometria em um potencial fixo. Foram realizados diversos ensaios eletroquímicos, em eletrodos sem a modificação de Au e eletrodos com a eletrodeposição como objeto de comparação. Constatou-se que a eletrodeposição de Au nos eletrodos ocorreu conforme medidas de voltametria cíclica em uma solução de K3[Fe(CN)6] 10 mmol e 0,1 mol/L KCl em diferentes velocidades de varredura. Foi utilizada uma solução aquosa de H2SO4 0,5 mol/L para a verificação da estabilidade do eletrodo e se comparar com o eletrodo sem a modificação de Au. Foram realizados ensaios com uma solução tampão fosfato-salino (PBS) e PBS-DA para se obter a curva analítica, os valores de limite de detecção e a sensibilidade dos eletrodos fabricados. Obteve-se uma resposta comparativamente adequada dos eletrodos nos ensaios realizados, mostrando o seu potencial para testes em amostras reais.

Palavras-chave: Sensores. Au nanoporoso. Dopamina.

Referências:

1 COLLINSON, M. M. Nanoporous gold electrodes and their applications in analytical chemistry. **ISRN Analytical Chemistry**, v. 2013, p. 692484-1-692484-21, 2013. DOI 10.1155/2013/692484.

2 QIU, H.-J. *et al.* A novel nanoporous gold modified electrode for the selective determination of dopamine in the presence of ascorbic acid. **Colloids and Surfaces B**, v. 69, n. 1, p. 105-108, Feb. 2009.

3 SAJID, M. *et al.* Chemically modified electrodes for electrochemical detection of dopamine in the

presence of uric acid and ascorbic acid: a review. **Trends in Analytical Chemistry**, v. 76, p. 15-26, Feb. 2016. DOI 10.1016/j.trac.2015.09.006.

79

IC38

Espectroscopia vibracional de modelos de membrana celular através da Geração de Soma de Frequências (Espectroscopia SFG)

FREIRE, B.
bruna_borges@usp.br

Diversos processos celulares dependem da interação da membrana com moléculas no citoplasma ou no meio extracelular.(1) Portanto, o estudo da estrutura das membranas celulares e sua interação com outras moléculas é fundamental para o avanço da biologia celular. Para a realização de tais estudos, são utilizados sistemas miméticos de membranas, como lipossomos e vesículas, que mimetizam a bicamada lipídica, e filmes de Langmuir, que mimetizam um folheto da membrana. Estes últimos destacam-se como uma das mais eficientes ferramentas, devido a ser possível controlar o empacotamento da monocamada, variar as propriedades físico-químicas da subfase, controlar a composição do filme e transferir a monocamada para um substrato sólido.(1) Diversas técnicas podem ser empregadas para estudo dos filmes de Langmuir, sendo a espectroscopia vibracional por Geração de Soma de Frequências (SFG – do inglês *Sum-Frequency Generation*) uma técnica bastante poderosa. Essa técnica permite obter o espectro vibracional das moléculas que estão na interface, assim como compreender a conformação das cadeias hidrofóbicas, que dependem do grau de compactação das moléculas.(2) A relação entre o espectro SFG e a compactação das cadeias hidrofóbicas já fora investigada em outros estudos, no entanto, apenas para ácidos graxos simples de cadeia única e para lipídeos de cadeias duplas saturadas.(3) A fim de investigar filmes mais realistas, torna-se necessário o estudo de lipídios com cadeias insaturadas e ramificadas, que formem filmes mais fluidos, a nível microscópico. Portanto, nosso objetivo é entender a correlação entre o espectro SFG desses filmes envolvendo lipídeos mais complexos e o grau de compactação do filme. Assim, a primeira etapa desse projeto está sendo selecionar os lipídios que formem filmes homogêneos, sem separação de fases ao comprimir a monocamada. Isso é feito por buscas de artigos na literatura e por experimentos de microscopia a ângulo de Brewster para os sistemas que ainda não foram reportados na literatura, com a qual é possível visualizar se durante a compressão do filme ocorre a formação de domínios lipídicos. Assim, esperamos verificar se nesses casos também haverá uma forte correlação entre o espectro SFG das cadeias e o empacotamento molecular médio. Tal estudo contribuirá para a extensão da espectroscopia SFG ao estudo de modelos de membrana mais realísticos.

Palavras-chave: Filmes de Langmuir. Espectroscopia vibracional. Microscopia a ângulo de Brewster.

Referências:

1 ELDERDFI, M.; SIKORSKI, A. F. Langmuir-monolayer methodologies for characterizing protein-lipid interactions. **Chemistry and Physics of Lipids**, v. 212, p. 61–72, 2018. DOI: 10.1016/j.chemphyslip.2018.01.008.
2 LAMBERT, A. G.; DAVIES, P. B.; NEIVANDT, D. J. Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: a tutorial review. **Applied Spectroscopy Reviews**, v. 40, n. 2, p. 103–145, 2005.
3 GUYOT-SIONNEST, P.; HUNT, J. H., SHEN, Y. R. Sum-frequency vibrational spectroscopy of a Langmuir film: study of molecular orientation of a two-dimensional system. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 14, p.1597–1600, 1987.

80

IC39

Preparação de nanoestruturas de g-C3N4 de baixo custo: estudo da eficiência fotoquímica através da geração de hidrogênio pela fotossíntese artificial

SANTOS, A. M. S.; GONÇALVES, R. V.[1]

anasanches@estudante.ufscar.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Uma das principais fontes de energias limpas atualmente é a energia solar. Nesse contexto, a produção de hidrogênio verde produzido por fotocatálise apresenta-se como uma possibilidade interessante de armazenar energia solar em energia química. Quando produzido por este método, o hidrogênio pode ser considerado uma fonte limpa, renovável e um combustível de zero emissão pois é utilizado apenas água, luz solar e um fotocatalisador para produzi-lo e é gerado apenas hidrogênio e oxigênio nessa reação.(1) Um dos materiais semicondutores de óxido não-metálico mais promissor é o nitreto de carbono grafítico (g-C3N4), por apresentar energia de band-gap de 2,7 eV, permitindo absorver luz solar na faixa do espectro do visível e posição de bandas energeticamente adequadas para foto-reduzir e foto-oxidar as moléculas de água. (2) Nitreto de carbono grafítico foi sintetizado a partir da pirólise da uréia que é um precursor de baixo custo, não tóxico e abundante, permitindo uma produção em larga escala. As reações de pirólise foram realizadas em diferentes temperaturas (450°C, 500°C, 550°C e 600°C) com taxa de aquecimento de 3°C/min por 2h. Os resultados de difração de raios X mostraram picos característicos do g-C3N4 em todas as amostras, correspondentes aos planos cristalinos (002) e (100), que são característicos de sistemas aromáticos e ao empacotamento estrutural de unidades de tri-s-triazina.(3) A estrutura eletrônica foi resolvida utilizando a técnica de espectroscopia de fotoelétrons de raios X para as linhas de emissão do N 1s e do C 1s, associados às ligações estruturais do anel aromático do nitreto de carbono grafítico em todas as amostras. Esses picos se tornam mais intensos com o aumento da temperatura o que indica maior formação de estruturas aromáticas na amostra produzida a 600°C. Tanto os padrões de raios X quanto de XPS confirmam a formação de nitreto de carbono grafítico em todas as amostras. A amostra que apresentou maior atividade fotoquímica foi à produzido a 600°C, com um evolução de H2 de 21 mol após 12h sob irradiação de luz visível.

Palavras-chave: Hidrogênio verde. Nanomateriais. g-C3N4. Fotocatálise.

Referências:

1 WANG, Z.; LI, K; DOMEN, C. Recent developments in heterogeneous photocatalysts for solar-driven overall water splitting, **Chemical Society Reviews** v.48, n.7,p.2109–2125, 2019. DOI: 10.1039/c8cs00542g.

2. WEN,J.; XIE, J.; CHEN, X.; LI,X. A review on g-C 3 N 4 -based photocatalysts, **Applied Surface Science** v.391, p. 72–123, 2017. DOI: 10.1016/j.apsusc.2016.07.030.

3 ZHU, B.;. XIA, P.; HO, W.; YU, J. Isoelectric point and adsorption activity of porous g-C 3 N 4. **Applied Surface Science**, v.344, p.188–195, 2015.DOI:10.1016/j.apsusc.2015.03.086.

IC40

Implementação e manutenção de código computacional de estrutura eletrônica de semicondutores

PAULI, I. G.[1]; SIPAHI, G.[1]

iangiestas@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O LFC desenvolveu um framework de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores, que permite utilizar o máximo de desempenho possível usando um computador de mesa. No entanto, ao longo de 20 anos de desenvolvimento o código acabou se tornando muito complexo de manter ou realizar novas modificações. Baseando-se em uma série de observações feitas no período anterior do presente projeto, está sendo desenvolvida uma nova versão, que já reproduz resultados de trabalhos anteriores utilizando o código antigo, através de métodos de diagonalização direta (1-2) disponíveis no LAPACK. No entanto, a partir de um certo número de ondas planas este algoritmo deixa de ser viável, pois é necessário construir a matriz inteira na memória. Sendo assim, outro método de diagonalização desenvolvido no laboratório foi implementado, baseado no LOBPCG. Com a implementação deste algoritmo, foram feitos diversos testes para encontrar e corrigir os problemas que surgiram, até conseguir resultados idênticos aos usando o LAPACK. Atualmente, testes estão sendo feitos para verificar a escalabilidade de ambos os métodos com a entrada e com o número de autovalores. Resultados preliminares indicam que para sistemas grandes, nosso método escala com a entrada em N_2 sendo mais rápido, a partir de um certo N_0, do que o método usual que escala com N_3. Porém é necessário investigar a estabilidade do algoritmo em função da entrada e do número de autovalores procurados, já que para determinadas combinações de fatores o nosso método falha em convergir.

Palavras-chave: Simulações numéricas. Método KP. Algebra linear computacional.

Referências:

1 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. **Matrix computations.** 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013. 2 MEYER, C. **Matrix analysis and applied linear algebra.** Philadelphia: SIAM, 2000.

IC41

O uso do aplicativo Socrative como ferramenta de ensino para aprendizagem móvel

TRANZIL, V. T. R.[1]; BARROS, M.[1]

vinicios.tranzil42@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os dias atuais estão marcados fortemente pela chamada hiperconectividade, em que o acesso à informação jamais esteve tão acessível. Os dispositivos móveis deram um novo sentido ao processo de ensino e aprendizagem, pois agora com um simples toque na tela de um smartphone é possível se conectar de qualquer lugar e em tempo real a uma rede global de conhecimento. Neste cenário de transformação marcado pelas tecnologias digitais as estratégias de ensino e aprendizagem (que são predominantemente baseadas em aulas expositivas) também precisam ser revistas. Entre os diversos aplicativos disponíveis para dispositivos móveis que podem ser utilizados para auxiliar um professor a organizar suas aulas nesta modalidade de ensino (mobile learning), assim como realizar uma avaliação formativa com os seus alunos, está o Socrative App. Este aplicativo serve para diversos propósitos, incluindo aplicação de questionários com questões de múltipla escolha, verdadeiro ou falso ou, até mesmo questões dissertativas com respostas curtas ou longas. (1) Também permite que o professor controle o tempo de entrega dessas questões, podendo optar entre navegação livre entre as questões, respostas sequenciais. Além disso, também permite salvar as respostas em forma de relatórios para que o professor tenha um feedback em tempo real sobre a evolução conceitual dos alunos, tanto individualmente como em grupo. O objetivo do nosso projeto consistiu na elaboração de um teste conceitual sobre física das cores para alunos do Ensino Médio utilizando o aplicativo Socrative como uma ferramenta para promover uma estratégia de ensino por aprendizagem móvel.Com isso pretendemos contribuir para a implementação de tecnologias digitais no curso de Física do Ensino Médio e auxiliar os professores no uso de dispositivos móveis em sala de aula para promover maior engajamento e motivação dos alunos.

Palavras-chave: Metodologia ativa. Ensino hibrido. Socrative.

Referências:

1 ANASTACIO, M. A. S.; VOELZKE, M. R. The use of Socrative application as an engagement tool in the learning process: an application of digital information and communication technologies in physics' education. **Research, Society and Development**, v. 9, n. 3, p. e51932335, 2020. DOI: 10.33448/rsd-v9i3.2335./view/2335. Acesso em: 18 jun. 2021.

IC42

Síntese e caracterização de nanopartículas luminescentes para aplicações em sistemas supramoleculares

BRAMBILLA, G. V.[1]; ARAI, M. S.[2]; MERIZIO, L. G.[2]; CAMARGO, A. S. S.[2]

gabrielgvb1998@gmail.com

[1]Instituto de Química de São Carlos - USP

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

Nanopartículas luminescentes por conversão ascendente de energia (UCNPs) são uma classe de materiais com diversas aplicações, desde a área de terapia fotodinâmica, bioimageamento e sensoriamento (1) até a geração e armazenamento de energia em células solares. (2) Essas UCNPs emitem luz via processos anti-Stokes, convertendo radiação de menor energia (infravermelho - IV) em radiação de maior energia (visível). Elas costumam ser empregadas junto de outras moléculas e/ou nanoestruturas (NEs), formando os chamados sistemas supramoleculares, seja para otimização de suas propriedades químicas e físicas ou para a geração de diferentes propriedades de acordo com a aplicação desejada. Nanopartículas de ouro em forma de bastão (AuNRs) são comumente usadas na construção de sistemas supramoleculares com UCNPs, uma vez que estas possuem duas bandas plasmônicas características, uma fixa em 525 nm e outra modulável de acordo com o comprimento longitudinal das AuNRs, podendo ser otimizada para o mesmo comprimento de onda de emissão das UCNPs, promovendo a supressão de sinal por transferência de energia e formando um sistema ideal para aplicação em sensoriamento e quantificação de diferentes substâncias, bactérias etc. (3) Nesse trabalho foram sintetizadas UCNPs hexagonais de NaYF₄ dopadas com Yb³⁺/Er³⁺, para emissões na região do verde e vermelho, ou Yb³⁺/Tm³⁺, para emissões na região do azul e vermelho, com alta intensidade de emissão via decomposição térmica, e então modificadas com o recobrimento por "cascas" de NaYF₄ e sílica mesoporosa (mSiO₂) para potencializar ainda mais a emissão das UCNPs e aumentar a compatibilidade em meio aquoso. Também foram sintetizadas AuNRs pelo método de crescimento de germes, para serem usadas como supressoras da emissão das UCNPs. Todas as NEs foram caracterizadas com técnicas espectroscópicas e microscópicas, e foram feitos testes de supressão do sinal misturando as UCNPs e AuNRs, obtendo resultados promissores para as aplicações desejadas na área de sensoriamento.

Palavras-chave: Nanopartículas luminescentes. Íons terras raras. Sistemas supramoleculares luminescentes.

Referências:

1 GRÜNER, M. C.; ARAI, M. S.; CARREIRA, M.; INADA, N. ; CAMARGO, A. S. S. Functionalizing the mesoporous silica shell of upconversion nanoparticles to enhance bacterial targenting and killing via photosensitizer-induced antimicrobial photodynamic therapy. **ACS Applied Bio Materials,** v. 1, n. 4, p.1028-1036, 2018. 2 LI, Y. *et al.* Heterodimers made of upconversion nanoparticles and metal-organic frameworks. **Journal of the American Chemical Society** ,v. 139, n. 39, p. 13804−13810, 2017. 3 HE, M.; LI, Z.; GE, Y.; LIU, Z. Portable upconversion nanoparticles-based paper device for field testing of drug abuse. **Analytical Chemistry**, v. 88, n. 3, p. 1530-1534, 2016.

IC43

Triagem de compostos para a identificação de fármacos contra o vírus Chikungunya utilizando sistema replicon subgenômico

POLICASTRO, L. R.[1]; DOLCI, I.[1]; FERNANDES, R. S.[1]; GIL, L. H. V. G.[2]; OLIVA, G.[1]

lrpolicastro@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Centro de Pesquisas Aggeu Magalhães

O vírus Chikungunya (CHIKV), causador da febre Chikungunya, é um arbovírus transmitido pelo mosquito *Aedes aegypti*, que periodicamente provoca epidemias ao redor do mundo. Desde o surto de 2014 no Brasil, o número de casos de infecção pelo CHIKV tem aumentado, podendo se tornar um sério problema de saúde pública. Em 2020, aproximadamente 98.000 casos da doença foram reportados no país, evidenciando o potencial do vírus em causar novos surtos. Os principais sintomas da febre Chikungunya são similares aos de outras arboviroses, entretanto, o CHIKV também afeta o sistema nervoso central, podendo causar diferentes tipos de distúrbios neurológicos como encefalite, síndrome de Guillain-Barré e polineuropatia. (1) Atualmente, não existem vacinas ou fármacos específicos contra o CHIKV, e, portanto, há uma grande necessidade em se identificar fármacos capazes de amenizar a disseminação do vírus e a morbidade associada à doença. Uma abordagem que permite a identificação de agentes antivirais em formato de triagem de alta performance (*High-throughput screening*, HTS), de forma rápida, segura e eficiente é o uso de sistemas replicons subgenômicos. Nestes, os genes que codificam as proteínas estruturais do vírus são substituídos por um gene repórter, que permite analisar a replicação viral, ao mesmo tempo em que não apresenta risco de produção de novos vírions. (2) O objetivo deste estudo foi utilizar a linhagem replicon repórter de CHIKV, denominada BHK-21-Rep-T7-Gluc-nSP, que expressa o replicon subgenômico contendo o gene da Gaussia luciferase (Gluc) como repórter e o da neomicina fosfotransferase (Neo), que permite manter o sistema de forma estável no citoplasma celular, para a triagem de bibliotecas de pequenas moléculas. Inicialmente, os ensaios HTS antivirais compostos pela avaliação da atividade da Gluc e pelo ensaio de proliferação celular baseado em MTT (3) foram realizados para os compostos da MMV/DNDi COVID Box, que contém 160 moléculas com atividade antiviral predita contra o SARS-CoV-2 (*Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2*), disponíveis no mercado ou em fase de desenvolvimento, a 10 μM. Destes, 17 moléculas inibiram a atividade da Gluc em $> 80\%$ e destas, 4 exibiram baixa toxicidade. Para estas 4 moléculas selecionadas (viabilidade celular $> 80\%$), o vasodilatador Ethaverine, o antifúngico Itraconazol, o antifúngico Cicloheximida e o agente antitumoral Delanzomib, serão realizadas as curvas dose-resposta para determinar os valores de concentração efetiva (EC50) e citotoxicidade (CC50). Dessa forma, serão determinados os índices de seletividade (IS, CC50/EC50) desses 4 compostos, a fim de se demonstrar o potencial de cada um deles como agente anti-CHIKV.

Palavras-chave: Arboviroses. Alfavírus. Replicon.

Referências:

1 SILVA, R. B.; ARAUJO, M. I. F.; BARBOSA, P. P. S. Dengue, Zika Fever and Chikungunya: biological aspects and situation in South America between 2015 and 2020. **Research, Society and Develop-**

ment, , v. 10, n. 6, p. e36710615539, 2021. DOI: 10.33448/rsd-v10i6.15539. 2 FERNANDES, R. S. *et al*. Reporter replicons for antiviral drug discovery against positive single-stranded RNA viruses. **Viruses**, v. 12, n. 6, p. 598, 2020. DOI: 10.3390/v12060598. 3 LI, J. Q. *et al*. Development of a replicon cell line-based high throughput antiviral assay for screening inhibitors of Zika virus. **Antiviral Research**, v. 150, p. 148-154, 2018. DOI: 10.1016/j.antiviral.2017.12.017.

86

IC44

Triagem de compostos para a identificação de fármacos contra o vírus Zika utilizando sistema replicon subgenômico

DOLCI, I.[1]; POLICASTRO, L. R.[1]; OLIVA, G.[1]; FERNANDES, R. S.[1]
isabela@estudante.ufscar.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O Zika vírus é um arbovírus transmitido pela picada do mosquito *Aedes aegypti*, que se tornou um problema de saúde pública durante o surto de 2015/2016 nas Américas e principalmente no Brasil, onde foi relacionado aos casos de microcefalia e síndrome de Guillan-Barré. A identificação de casos autóctones em 87 países, em 2019, evidencia o enorme potencial do ZIKV em emergir futuramente como uma nova epidemia. Portanto, a busca por tratamentos efetivos contra a infecção viral se torna necessária, visto que ainda não existem vacinas ou fármacos disponíveis contra o ZIKV. A identificação de agentes antivirais de forma rápida e eficiente depende de ensaios celulares/bioquímicos que possam ser realizados em modo de triagem de alta performance (*high-throughput screening*, HTS), como os ensaios baseados em replicon. Estes, são sistemas subgenômicos, nos quais os genes que codificam as proteínas estruturais do vírus são substituídos por uma proteína repórter, o que permite a identificação de inibidores da replicação viral de forma segura, uma vez transfectados em células de mamíferos susceptíveis. O objetivo deste trabalho foi utilizar a linhagem replicon repórter de ZIKV, denominada BHK-21-RepZIKV_IRES_Neo, que expressa o replicon viral contendo o gene da *Renilla luciferase* (RLuc) e o gene da neomicina fosfotransferase (Neo), o qual permite a manutenção deste sistema de forma estável no citoplasma celular (1), para a triagem de bibliotecas de pequenas moléculas em formato HTS. Inicialmente, os ensaios antivirais compostos pela avaliação da atividade da Rluc (2) e pelo ensaio de proliferação celular baseado em MTT (3), foram realizados para duas bibliotecas do MMV/DNDi, a COVID *Box* (160 compostos) e *Pathogen Box* (400 compostos), compostas por moléculas com atividades antibacterianas, antifúngicas e antivirais, a 10 μM. Do total de 560 compostos avaliados, 88 diminuíram os sinais da luciferase em $\geq$ 80% e 11 destes, exibiram baixa toxicidade. Para estas 11 moléculas selecionadas ($\geq$ 80% de viabilidade celular), os valores de concentração efetiva (EC50) e citotoxicidade (CC50) foram determinados através das curvas dose-reposta e usados para calcular os índices de seletividade (IS = CC50 / EC50). Quatro compostos, Remdesivir, um agente antiviral; Silmitasertib, um agente antitumoral; Bedaquilina, um agente antimicobacteriano e o composto MMV020391, diminuíram os sinais de Rluc de maneira dose-dependente com valores de EC50 na faixa de baixo micromolar. O Remdesivir e o Silmitasertib, ambos da Covid Box, exibiram baixa citotoxicidade, resultando em IS de >32,67 e >14, respectivamente. Já, a Bedaquilina e o composto MMV020391, ambos da *Pathogen Box*, demonstraram moderada toxicidade para as células replicon, resutando em IS de >1,88 e >2,30, respectivamente. Os resultados obtidos para o Remdesivir mostram que este composto é um potente inibidor da replicação viral (IS >32,67) e, portanto, seu potencial como agente anti-ZIKV será melhor caracterizado através de ensaios de qRT-PCR e imunofluorescência indireta (IF).

Palavras-chave: Zika. Replicon. Descoberta de fármacos.

Referências:

1 FERNANDES, R.S.;GODOY,A.S.; SANTOS. I.A, ;NOSKE, G.D.; OLIVEIRA, K.I.Z.; GAWRILJUK, V.O.; GOMES, J.A.C.; OLIVA, G. Discovery of an imidazonaphthyridine and a riminophenazine as

potent anti-Zika virus agents through a replicon-based high-throughput screening. **Virus Reseacrh**, v.2, n.299, p.198388,July 2021. 2 XIE, X.; JING, Z.; CHAO, S.; YUJAO, Y.; DIEUDONNE, B.; KUM, K.; DALLMEIER, J.; NEYTS,S.; PEI, Y. S..Zika vrus replicons for drug discovery. **Ebiomedicine**, v.12,p.156-160,Oct.2016. 3 LI, J. Q.*et al*. Development of a replicon cell line-based high throughput antiviral assay for screening inhibitors of zika virus. **Antiviral Research,** v.150 p.148–154, 2018.. DOI; /10.1016/j.antiviral.2017.12.017.

88

IC45

Fabricação de acopladores ópticos direcionais via fotopolimerização por absorção de dois fótons

JORGE, G. H. A.; OTUKA, A. J. G.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]
gabriel.henrique.jorge@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Guias de onda são dispositivos fotônicos que têm sido desenvolvidos desde os anos 1970, com o surgimento das fibras ópticas. Estão fortemente presentes na comunicação óptica e já bem estabelecidos em chips ópticos integrados, tendo ampla aplicação tanto na tecnologia, quanto na pesquisa fundamental. Embora boa parte das pesquisas nesta área utilize plataformas de silício, nos últimos anos tem havido um crescente interesse no estudo de outros sistemas, como os poliméricos, promissores em aplicações tridimensionais na microescala. Dentre as diversas técnicas para a fabricação de dispositivos poliméricos micrométricos, se destaca a fotopolimerização por dois fótons (2PP), método baseado no fenômeno óptico não-linear de absorção de dois fótons (2PA), previsto inicialmente por Maria Göppert-Mayer.(1)Promovendo o fenômeno em um fotoiniciador, ocorre a quebra de uma ligação química, gerando-se radicais livres que desencadeiam a polimerização de resinas acrílicas em uma dada amostra, possibilitando uma microfabricação aditiva com resolução inferior ao limite de difração. Vantagens memoráveis deste método incluem a flexibilidade de formas, biocompatibilidade e a conveniente facilidade de sua funcionalização - por exemplo, com a incorporação de compostos de interesse. Tendo em vista que a produção de guias de onda via 2PP tem ganho impulso e fornecido resultados promissores na última década (2), pretende-se empregar o método de 2PP para a fabricação de geometrias de acopladores ópticos direcionais, previamente simuladas computacionalmente. Um laser Ti:safira, centrado em 780 nm, com largura de banda 50 nm, taxa de repetição de 86 MHz e pulsos de 100 fs proporciona a polimerização em resinas monoméricas. Além da possibilidade de utilizar diferentes resinas, parâmetros como a intensidade do feixe, tempo de exposição e densidade de pontos são essenciais para o controle das características finais das microestruturas, como rugosidade e rigidez.(3) Os dispositivos estudados aqui podem fornecer soluções como conexões de guia de ondas, usadas atualmente em pesquisas para habilitar circuitos fotônicos complexos, combinando muitos componentes individuais em um sistema para cumprir funções ópticas complexas. No futuro, por exemplo, a óptica quântica integrada poderia ser possível em um chip.(2)

Palavras-chave: Óptica não linear. Fotopolimerização por dois fótons. Guias de onda.

Referências:

1 GÖPPERT-MAYER M. Uber elementarakte mit zwei quantensprüngen. **Annalen der Physik**, v. 401, n. 3, p. 273- 294, 1931.
2 EL-TAMER, A.; HINZE, U.; CHICHKOV, B. N. Two-photon polymerization in optics, microfluidics, and biomedicine. *In*: SUGIOKA, K.(ed.) **Handbook of laser micro- and nano-engineering**. Switzerland: Springer Nature, 2020.
3 ZHOU, X.; HOU, Y.; LIN, J. A review on the processing accuracy of two-photon polymerization. **AIP Advances**, v. 5, n.3, p.030701,2015.

89

IC46

Implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa na IBM Quantum Experience

OLIVEIRA, A. N.[1]; OLIVEIRA, E. V. B.[1]; SANTOS, A. C.[1]

antonio.nunes@estudante.ufscar.br

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

O paradigma da computação quântica se propõe a resolver problemas clássicos de forma mais eficiente se beneficiando de propriedades quânticas como superposição e emaranhamento. Nesse sentido, o algoritmo de Deutsch-Jozsa foi o primeiro a mostrar ganho quântico, ao analisar a característica de uma função, determinando se esta é balanceada ou constante em uma única avaliação.(1) Tendo em vista esses importantes aspectos, este trabalho tem por objetivo a introdução aos conceitos básicos e pertinentes à área da computação quântica, visando a implementação de algoritmos simples em uma interface amigável ao usuário, a IBMQ Experience, que disponibiliza gratuitamente simuladores e máquinas quânticas reais. Assim, foi feita uma discussão a respeito das diferentes topologias dos computadores quânticos da IBMQ utilizados, que apresentam erros associados às interações entre qbits e suas portas lógicas quânticas. Neste trabalho realizamos a implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa no computador quântico IBMQ-Manila da IBM Quantum Experience, com 1024 e 8192 experimentos identicamente preparados (2), para análise da acurária estatística. Os resultados das probabilidades foram esboçados em histogramas, tanto para o simulador quanto para o computador físico e a partir desses resultados fizemos uma análise comparativa com relação às características probabilísticas da mecânica quântica, e, como os erros de dissipação e decoerência, inerentes aos sistemas quânticos reais, afetam a fidelidade do algoritmo de Deutsch-Jozsa.

Palavras-chave: Computação quântica. Algoritmos quânticos. IBMQ experience.

Referências:

1 NIELSEN, M.A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information:** 10th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.

2 LI, Z.*et al.* Synthesis of deutsch-Jozsa circuits and verification by IBM Q. **International Journal of Theoretical -Physics**, v.59, p.1668-1678, 2020. DOI: 10.1007/s10773-020-04434-z.

90

IC47

Desenvolvimento de fotocatalisadores de AgVO3 para degradação de efluentes industriais.

COSTA, V.[1]; NOGUEIRA, I.[1]

vc19935@gmail.com

[1]Universidade Federal do Amazonas - UFAM

Desde a época da Grécia antiga a água é considerada um componente fundamental para a vida, então, tendo em vista a importância que a água tem é necessário encontrar e desenvolver métodos que torne a água acessível para o consumo das pessoas no mundo todo. A água pode ser contaminada por vários motivos, seja por agrotóxicos, esgoto, fertilizantes ou corantes da indústria têxtil. Os corantes geralmente são usados na indústria de processamento de alimentos, indústria têxtil, papel, etc.(1) A fotocatálise heterogênea é um dos processos de descontaminação que mais tem estado em relevância por ser um dos mais baratos, versáteis e mais amigáveis ao meio ambiente. Dentre os semicondutores utilizados no processo de fotocatálise heterogênea, os óxidos de vanadato de prata mostram ser bastante eficientes.(2) Especificamente, o AgVO3 é bastante reportado na literatura por ser um material polimorfo. Estes materiais decorados com os haletos de prata (AgI, AgBr ou AgCl) aumentam a eficiência na degradação de contaminantes por apresentar propriedades que permitem a alta absorção da luz visível.(3) Neste trabalho, foi proposto a obtenção de cristais de Vanadato de prata decorado com brometo de prata, AgVO3:AgBr e a investigação de seus potenciais fotocatalíticos para a degradação de corantes orgânicos. O vanadato de prata e o brometo de prata foram obtidos a partir do método de precipitação, com uma relação estequiométrica de 1:1. Nas análises de DRX observamos picos de AgVO3 mais alargados e não tão intensos quanto em outros difratogramas já observados, a explicação para a característica desses picos se dá pelo tamanho dos cristais. Materiais nanométricos apresentam em seus difratogramas picos mais alargados e com pouca intensidade, como observados no difratograma. Nas análises de DRX do AgBr observamos a presença de picos intensos, sem fase secundária e que indicam alto grau de cristalinidade. As fases foram indexadas e submetidas à análise na base de dados ICSD (Inorganic Crystal Structure Database). O tamanho e forma dos cristais foram analisados por Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), onde o vanadato de prata apresentou ter formato de nanotubos, com tamanho e forma bem definido. As imagens de MEV do AgBr mostraram que o material tem formato esferoidal, com tamanho e forma bem definidas. Os testes fotocatalíticos foram realizados para as moléculas dos corantes Rodamina B e Azul de Metileno em solução aquosa na presença de radiação UVc.

Palavras-chave: Fotocatálise. Vanadato de prata. Brometo de prata.

Referências:

1 BENSALAH, N.; ALFARO, M.A. Q..; MARTINEZ-HUITLE,C.A. Electrochemical treatment of synthetic wastewaters containing Alphazurine A dye,**Chemical Engineering Journal,** v.149, n.1-3,p. 348–352,2009.

2 KUMAR, R *et al.* Conducting polymers-based photocatalysis for treatment of organic contaminants in water. **Chemical Engineering Journal Advances,** v.14, n.4,p.100047,2020. DOI: 10.1016/j.ceja.2020.100047.

3 GUO, J. *et al.* Efficient visible-light driven photocatalyst, silver (meta)vanadate::synthesis, morphology and modification, **Chemical Engineering Journal,**v.352,p,782-802,2018.DOI:

10.1016/j.cej.2018.07.071.

92

IC48

Atividade fotocatalítica de nanopartículas de ZnWO4 decoradas com AgI

COSTA, V.[1]; NOGUEIRA, I.[1]

vc19935@gmail.com

[1]Universidade Federal do Amazonas - UFAM

Cerâmicas avançadas são obtidas a partir de elementos como óxidos, carbetos e silicatos, com métodos de obtenção mais sofisticados e com amplas aplicações tecnológicas. Esses materiais semicondutores apresentam grande relevância científica dada as suas aplicações em fotocatálise, fotoluminescência e ótica.(1) Os tungstatos que pertencem a família das wolframitas apresentam alta aplicação em fotocatálise, dispositivos eletrônicos, etc. Esses tungstatos apresentam estrutura cristalina do tipo monoclínica, grupo espacial P2/C, com os átomos de zinco e tungstênio rodeado por seis átomos de oxigênio formando poliedros octaédricos distorcidos [ZnO6]/[WO6]. Tungstatos metálicos divalentes com estrutura wolframita apresentam atividade fotocatalítica sob irradiação UV quando usado para dividir agua e determinados poluentes orgânicos e, em alguns casos, chegando a ser melhor que o TiO2.(2) O halogeneto de prata (AgX, X = Cl, Br, I) é um material fotossensível importante amplamente usado em fotografia. A fotocatálise heterogênea de semicondutores provou ser um método eficaz para eliminar contaminantes orgânicos no ambiente.(3) No entanto, o ZnWO4 puro ainda tem uma fraca atividade fotocatalítica devido a sua insatisfatória absorção de luz e a rápida recombinação de pares de elétrons fotogeradores. Neste projeto, foi proposto melhorar as propriedades fotocatalíticas do ZnWO4. A síntese do ZnWO4 pelo método de precipitação em meio aquoso foi realizado com êxito. O padrão de Raios X mostrou a formação de fase única de ZnWO4. A decoração com AgI foi realizada por dois métodos distintos: fotorredução-precipitação assistido por ultrassom e precipitação-deposição. O método de fotorredução-precipitação assistido por ultrassom foi o mais indicado para a decoração. O padrão de difração de Raios X mostrou a formação das duas fases após a decoração, ZnWO4 e AgI. Por microscopia Eletrônica de Varredura – MEV foi possível observar a formação de grãos em formato esférico na superfície do ZnWO4. Os parâmetros de rede e volume da célula unitária serão calculados pelo método de Rietveld. O cálculo do "Band Gap" ótico será realizado por intermédio da espectroscopia eletrônica na região do ultravioleta visível (UV vis). O desempenho fotocatalítico das amostras obtidas serão avaliadas pela degradação de corantes têxtis Rodamina B, azul de metileno e alaranjado de metila sob condições de luz UVc.

Palavras-chave: Fotocatálise. Tungstato de zinco. Iodeto de prata.

Referências:

1 SILVA, A, L. **Estudo estrutural, morfologico e ótico dos cristais de a-AgWO4 dopados com Mo6+ via co-precipitação assistida por PVP.**2015. Dissertacao(Mestrado) - Instituto de Quimica, Universidade Estadual Paulista, Araraquara,.2015.

2 FU,H.B.; LIN, J.;ZHANG,. L. W.;ZHU, Y.F. Photocatalytic activities of a novel ZnWO4 catalyst prepared by a hydrothermal process, **Applied Catalysis A**, v.306,p.58-67,2006.

3 WANG, P. ; HUANG, B. B.; QUIN, X.Y. ;ZHANG, X.Y.;DAI, Y. WEI,J.Y. ; WHANGBO,M.Ag@AgCl: a highly eficiente and stable photocatalytic active under visible light, **Angewandte Chemie**, v.47, n.41, p.7773, 2008.

IC49

Amebas de Vida Livre: elaboração da ferramenta de visualização PVT e identificação de Naegleria spp. e Acanthamoeba spp. no Rio Monjolinho em São Carlos - SP

ISSA, M.[1]; BELLINI, N. K.[1]; CEDRIM, D.

matheus.issa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Amebas de Vida Livre (AVL) são microrganismos eucariontes unicelulares pertencentes ao Reino Protista amplamente encontrados na natureza, mas que, apesar de grande parte viver livremente no ambiente, apresentam alguns gêneros parasitas oportunistas facultativos, como é o caso de *Naegleria* spp. e *Acanthamoeba* spp. .(1) Espécies pertencentes a esses grupos apresentam alta patogenicidade, provocando normalmente infecções associadas ao Sistema Nervoso Central (SNC), cuja rápida progressão leva os pacientes a óbito em um curto período de tempo. Exemplo disso é a Meningoencefalite Amebiana Primária (PAM) causada pela *N. fowleri*, bem como a Encefalite Amebiana Granulomatosa (GAE) causada por alguns representantes do gênero *Acanthamoeba*. No Brasil, os estudos relacionados a esses microrganismos são bastante escassos, não havendo um preciso mapeamento da distribuição ambiental deles.(2) Consequentemente, o desconhecimento da presença dessas amebas se torna um alto risco para a população, podendo levar a problemas de saúde pública em determinadas regiões do país. Além disso, as análises morfológicas hoje realizadas não são otimizadas, dificultando o processamento eficiente das amostras pesquisadas. Sendo assim, o presente projeto visa elaborar um programa de visualização baseado em chaves taxonômicas, a partir do guia de classificação Page (1988) (3), e verificar, a nı´vel molecular, a existência de espécies dos gêneros de AVL citados em 5 sı´tios de coleta do Rio Monjolinho na cidade de São Carlos, SP. Para a primeira questão, as características morfológicas das diferentes amebas descritas no guia mencionado são reunidas em tabelas, de modo a auxiliar a criação de um software baseado em coordenadas paralelas, por meio de técnicas de dados multivariados e geometria de alta dimensão, denominado PVT (do inglês, *Page's Visualization Tool*). Já para a segunda, são empregadas técnicas de biologia molecular tradicionais, partindo da extração do DNA genômico das amostras, passando por amplificação por PCR com oligonucleotı´deos especı´ficos para gênero, sequenciamento do DNA amplificado e análise bioinformática através de alinhamentos realizados com a ferramenta BLAST do NCBI (a partir do banco de dados GenBank). Dessa forma, é possível construir filogenias capazes de fornecer um panorama geral ambiental de dispersão desses microrganismos na região, contribuindo, em conjunto com o PVT, para a otimização e complementação de futuras pesquisas no tema.

Palavras-chave: Amebas de Vida Livre. PVT. Rio Monjolinho.

Referências:

1 SCHUSTER, F. L.; VISVESVARA, G. S. Free-living amoebae as opportunistic and non-opportunistic pathogens of humans and animals. **International Journal for Parasitology**, v. 34, n. 9, p. 1001-1027, 2004.

2 BELLINI, N. K. *et al.* Isolation of Naegleria spp. from a Brazilian water source. **Pathogens**, v. 9, n. 2, p. 90, 2020.

3 PAGE, F.C. **A new key to freshwater and soil Gymnamoebae:** with instructions for culture.

Pennsylvania: Freshwater Biological Association, 1988. (Culture collection of algae and protozoa)

95

IC50

Estudo vascular de fotocoagulação direta comparado com terapia fotodinâmica usando modelo de vasos sanguíneos de orelha de camundongo

ANDRADE, M. M.; STRINGASCI, M. D.[1]

matheusmarandrade@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Introdução: Lesões vasculares superficiais acometem até 50% da população em algum momento da vida. Ainda assim, os tratamentos disponíveis hodiernamente são conhecidos pela alta taxa de retorno do problema em curto prazo e pelos efeitos colaterais comuns.(1) O atual projeto visa aplicar uma possível alternativa em um modelo pré-clínico. Esta alternativa é a fototerapia por fotocoagulação direta, técnica que se aproveita da interação da luz visível com o tecido biológico para eliminar vasos próximos da superfície por meio da produção de coágulos intravasculares(2), e o modelo utilizado foi o de orelhas de camundongo. Objetivo: Desenvolvimento do equipamento luminoso para aplicação desta técnica e definição do protocolo de iluminação mais adequado, visando eliminar vasos com o menor dano possível ao tecido adjacente. Metodologia: O equipamento luminoso desenvolvido foi utilizado com irradiâncias entre 0,5 e 1,5 W/cm^2, durante 5 a 15 segundos. Os diferentes tempos de exposição aliados a diferentes irradiâncias constituíram 7 grupos de 3 a 5 animais cada. O resultado foi registrado por imagem de luz branca, Tomografia de Coerência Óptica (TCO) e histologia. Os melhores grupos tiveram a recuperação acompanhada por 8 dias. Resultados: O aparelho de iluminação desenvolvido é adequado. Nos registros com imagem de luz branca, a luz mostrou-se capaz de eliminar vasos, mas nos grupos de maior dose (1,5W/cm^2 por 15 s, 1W/cm^2 por 15 s e 0,5W/cm^2 por 15 s) este efeito foi aliado a um dano tecidual irreparável, enquanto no grupo de parâmetro 1,5W/cm^2 por 5 s o dano tecidual foi mais discreto. Dos grupos que não apresentaram dano tecidual, o grupo de iluminação de 0,5W/cm^2 por 5 s obteve resultados discretos de eliminação vascular, sugerindo os grupos intermediários (1W/cm^2 por 5 s e 0,5W/cm^2 por 10 s) como os mais prováveis candidatos a avanços no desenvolvimento desta técnica. Estes reduziram em mais de 20% o número de vasos superficiais em uma só sessão, além de tornarem mais discretos muitos dos remanescentes. Após 8 dias o tecido adjacente encontrava-se ainda completamente intacto na análise da imagem de luz branca de ambos os grupos, tendo se recuperado totalmente do edema e vermelhidão iniciais. Conclusões: As avaliações de histologia e TCO ainda são necessárias para ampliar o entendimento do processo de recuperação do tecido adjacente e adaptação dos vasos inicialmente pouco aparentes, mas o tratamento com fototerapia inicialmente mostra resultados promissores e com amplo espaço de manobra para criação de protocolos com maior número de sessões, uma vez que o parco efeito adverso de cada sessão parece não influenciar no resultado final. Novos estudos com diferentes intervalos buscando maior eficácia no resultado estético se tornam uma possibilidade, assim como o avanço para modelos mais próximos da aplicação clínica.

Palavras-chave: Fototerapia. Telangiectasia. Vascular.

Referências:

1 RIGBY, Kathryn A. *et al.* Surgery versus sclerotherapy for the treatment of varicose veins. **Cochrane Database of Systematic Reviews**, v.18, n.4, p.cd004980,2004.

2 SINGH, A. Ocular phototherapy. **Eye** v.27, p.190–198, 2013. DOI:10.1038/eye.2012.258.

97

IC51

Desenvolvimento da heteroestrutura CuWO4/BiVO4/FeCoOx com configuração de bandas otimizada para aplicações na fotossíntese artificial

RABELO, L.[1]; ROSA, W.[1]; GONÇALVES, R. V.[1]

lucasrabelo@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A divisão fotocatalítica da água (*water splitting*) através da fotossíntese artificial emerge como uma solução viável e eficiente para mitigar a crescente demanda energética e reduzir as emissões de gases poluentes na atmosfera. (1)Com efeito, a fotossíntese artificial emprega materiais semicondutores aptos a realizar a fotocatálise da água em hidrogênio solar (H_2), uma fonte de energia limpa e sustentável muito promissora para substituir os combustíveis fósseis.(2) Entretanto, em virtude de várias limitações intrínsecas desses materiais semicondutores (particularmente devido a recombinação de cargas), observa-se uma produção de H_2 muito menor que a taxa teórica esperada. Nesse contexto, diversas estratégias tem sido propostas para superar essas limitações, tais como: nanoestruturação, dopagem, heterojunções, entre outras. Assim sendo, objetivando produzir um sistema eficiente para aplicações na fotossíntese artificial, realizou-se nesse projeto uma heterojunção com filmes finos dos semicondutores CuWO_4 e BiVO_4 e a posterior deposição do co-catalisador FeCoO_x. Precisamente, o sistema CuWO_4/BiVO_4/FeCoO_x foi sintetizado através da técnica de pulverização catódica com um processo de três etapas, dadas por: (i) processamento dos materiais alvos dos semicondutores; (ii) deposição sequencial de filmes finos de CuWO_4 e BiVO_4 (originando a heterojunção CuWO_4/BiVO_4); (iii) deposição final de uma camada ultrafina do co-catalisador FeCoOx. Através das caracterizações de DRX, Raman, UV-VIS, XPS e MEV, demonstrou-se que a heteroestrutura proposta foi muito efetiva para os presentes propósitos, aprimorando a faixa de absorção visível e estabilidade em soluções eletrolíticas. Precisamente, a heterojunção CuWO_4/BiVO_4 apresentou uma excelente atividade catalítica na fotossíntese artificial, produzindo uma densidade de fotocorrente de 750μA/cm^2, muito superior aos semicondutores individuais (CuWO_4: 180μA/cm^2 e BiVO_4 : 250μA/cm^2). Conforme evidenciado pelas caracterizações, a performance superior da heterojunção é atribuída ao aprimoramento da estrutura de bandas: uma vez que as bandas de condução e valência do BiVO_4 são energeticamente maiores que aquelas do CuWO_4, desenvolve-se caminhos preferenciais direcionando os elétrons fotogerados na banda de valência do BiVO_4 para a banda de valência do CuWO_4; simultaneamente, os buracos excitados na banda de condução do CuWO_4 são energeticamente direcionados para a banda de condução de BiVO_4. Tais caminhos preferenciais aumentam o número de portadores de cargas e reduzem a recombinação de cargas. Por fim, a heteroestrutura CuWO_4/BiVO_4/FeCoO_x apresentou uma performance ainda superior, evidenciando que o co-catalisador FeCoOx foi efetivo em suprimir a recombinação dos pares elétron-buracos na superfície do sistema. Vale ressaltar que a heteroestrutura desenvolvida nesse projeto é inédita; além disso, não há trabalhos na literatura, conhecido pelos autores, reportando a formação de um sistema com dois filmes finos e a posterior deposição de co-catalisador (exclusivamente através da pulverização catódica). Em particular, a pulverização catódica é uma técnica de deposição física muito utilizada para obter filmes finos, caracterizando-se pela sua versatilidade e potencial para aplicação em larga escala.(3) Em suma, a estratégia proposta para aprimorar a performance dos semicondutores demonstrou-se efetiva e ideal para aplicações na produção de H_2 como fonte de

energia limpa e sustentável. O método desenvolvido nesse trabalho pode ser facilmente generalizado para diversas heteroestruturas e permite um controle mais rigoroso na alteração estrutural dos semicondutores.

Palavras-chave: Fotossíntese artificial. Filmes finos. Heterojunção.

Referências:

1 KROL, R; GRATZEL, M. **Photoelectrochemical hydrogen production**. New York: Springer, 2012.
2 MAEDA, K. Photocatalytic water splitting using semiconductor particles: history and recent developments. **Journal of Photochemistry and Photobiology C,**v. 12, n. 4, p. 237-268, 2011.
3 GONÇALVES, R.V. *et al*. Easy access to metallic copper nanoparticles with high activity and stability for CO oxidation. **ACS Applied Materials and Interfaces**, v. 7, n. 15, p. 7987-7994, 2015.

99

IC52

Aprendizado de técnicas de simulação computacional de semicondutores de baixa dimensionalidade

SALOMON, B.; SIPAHI, G.[1]

blrs2000@hotmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Para análises de sistemas físicos atuais, a abordagem computacional é uma ferramenta imprescindível. O Laboratório de Física Computacional desenvolve programas para realizar o cálculo de estruturas eletrônicas de semicondutores e possui um código geral, em Fortran, que está passando por um processo de revitalização. Esse projeto visa implementar o novo código,de forma a otimizar seus cálculos. Utilizando o fato de que semicondutores são geralmente sólidos cristalinos, exploramos as simetrias de suas estruturas com o intuito de desenvolver um programa para encontrar a primeira Zona de Brillouin (ZB) e sua região mínima. A característica importante e extremamente útil da primeira Zona de Brillouin é que, por sua construção, ela carrega em si a simetria do cristal.Todos os pontos do espaço recíproco (espaço de vetores de onda) daquela rede podem serdescritos a partir da primeira ZB.(1) Já com sua região mínima,constituída pelos pontos de maior simetria, bastante úteis no cálculo dos estados vibracionais e de energia dos elétrons, temos toda a simetria da Zona de Brillouin. Os métodos utilizados para encontrar as regiões foram baseados nos tradicionais utilizados na literatura com adaptações computacionais. Para isso foram feitos encontros com o orientador para encontrar tais adaptações, contornar as dificuldades e até alterar o método de abordagem do problema.O código possui quatro casos pré-definidos, já stá quase finalizado para as redes cúbicas e falta algumas alterações para a exagonal. A próxima etapa será a implementação ao código geral e passar pela fasede testes para detectar problemas e realizar suas correções.

Palavras-chave: Otimizar. Zona de Brillouin. Redes cristalinas. Semicondutores.

Referências:

1 ESTRUTURA: espalhamento, correlacao,simetria,gemetria,estruturas. pte III. Disponível em: https://sites.ifi.unicamp.br/brum/files/2014/01/FI104_JAB_1s2013_cap3-2.pdf. Acesso em: 17/06/2020.

IC53
Introduction to particle physics and quantum field theory

JUSTINO, L. R.[1]
lradicce@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Particle Physics studies the fundamental constituents of matter and the interactions among them, using experimental data obtained with particle accelerators and cosmic rays.(1) From a theoretical point of view, matter and fundamental interactions are described by Quantum Field Theories. In particular, the interactions of the Standard Model are explained through the exchange of mediating particles, associated with quantized fields. These studies are of great relevance, because they allow us to understand the physical world at the most fundamental level. This scientific initiation project proposes to study elementary particles and the quantum fields associated with the fundamental interactions. Initially, the project will address several topics, such as conservation laws, symmetries, the Quarks Model, the Standard Model, Feynman Calculus (2), Gauge Theories, the mathematical formalism of Field Theory and the canonical quantization of fields.(3) Then, a chosen topic will be studied in more detail.

Palavras-chave: Campos. Partículas elementares. Interações fundamentais.

Referências:

1 NE'EMAN, Y.; KIRSH, Y. **The particle hunters**. 2nd. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
2 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to elementary particles**. 2nd. ed. New York: John Wiley Sons, 2020.
3 LANCASTER, T.; BLUNDELL, S. J. **Quantum field theory for the gifted amateur**. New York: Oxford University Press, 2014.

101

IC54
Absorção multifotônica em derivados de perileno

BARBEDO, A.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]
artur.barbedo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

De maneira geral, quando tratamos da interação da luz com a matéria, podemos descrever esse fenômeno através da polarização induzida no meio. Quando lidamos com uma luz de baixa intensidade, a polarização pode ser dada de forma linear, regime da óptica linear.Porém, quando se tem altas intensidades não podemos descrever de forma linear, entrando no regime da óptica não linear. A partir do desenvolvimento do laser em 1960, tais fenômenos relacionados com a óptica não linear começaram a ser observados experimentalmente, e com isso, a busca por aplicações tecnológicas aumentou. O processo de absorção de dois fótons, por exemplo, é um fenômeno não linear já utilizado em alguns processos, como a limitação óptica e o armazenamento óptico. Então, além de procurar desenvolver técnicas mais eficazes, notou-se a necessidade de estudar materiais que tivessem melhores respostas. Nesses estudos, os materiais orgânicos se destacaram por terem altas respostas não lineares. Uma característica importante para que os materiais orgânicos tenham altas não linearidades é o fato de geralmente serem compostos pi-conjugados.(1) Neste projeto, temos como objetivo estudar os efeitos não lineares em um grupo dessas moléculas, nos derivados de perileno. Em específico, buscamos analisar a absorção de dois fótons, como também as técnicas experimentais envolvidas em sua medição. Entre essas técnicas, se destaca a Varredura-Z (Z-Scan).(2)Tal método consiste,em termos gerais, em medir a potênciatotal transmitida quando um feixe de pulsos ultracurtos atravessa uma mostra. Nesse sistema, variamos a posição do composto no eixo de transmissão do eixe, passando pelo foco. A transmitância é normalizada para eliminar os efeitos ineares, sendo assim possível extrair o coeficiente de absorção de dois fótons do gráfico. Os resultados obtidos pela Varredura-Z serão comparados com os resultados alcançados pela técnica de fluorescência multifotônica, para confirmar os dados.Espera-se que esses derivados tenham altas seções de choque de absorção de dois fótons,sendo então úteis para a fabricação de novas tecnologias.

Palavras-chave: Óptica não linear. Absorção multifotônica. Perilenos. Varredura-Z 4.

Referências:

1 PRASAD, P. N.; WILLIANS, D. J. **Introduction to nonlinear optical effects in molecules and polymer.** New York: John Wiley Sons., 1991. v.1.p. 320.
2 SHEIK-BAHAE, M.; SAID, A. A.; WEI, T.-H.; HAGAN, D. J.; STRYLAND, E. W. V. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v.26, n.4, p. 760-769, 1990.

102

IC55

Estudo de partículas coloidais aprisionadas em armadilhas ópticas

GALHASE, G. B.; MUNIZ, S. R.[1]

gabrielgalhase@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A termodinâmica estuda as relações entre energia, calor e trabalho, e em como essas relações podem ser utilizadas em processos físicos, químicos, bioquímicos e tecnológicos. Com o avanço da nanotecnologia e das tecnologias quânticas, novas questões têm surgido acerca do entendimento da termodinâmica de sistemas mesoscópicos (escala nanométrica), tanto no limite clássico como quântico. No laboratório, podemos investigar algumas dessas questões utilizando a pinça óptica, que é uma armadilha óptica produzida com luz laser concentrada, para aprisionar desde átomos e moléculas individuais até partículas de vários micrometros.Neste trabalho apresentamos resultados parciais de um projeto de iniciação científica dedicado ao estudo dos princípios fundamentais da termodinâmica estocástica, que está relacionada à descrição de sistemas esoscópicos fora do equilíbrio.Aqui, estudamos o modelo de uma partícula coloidal-Browniana sujeita à dinâmica de Langevin, sujeitas a flutuações térmicasEsse modelo pode ser facilmente produzido e estudado no laboratório tilizando micropartículas aprisionadas na pinça óptica.(1) No pôster serão apresentados resultados de estudos numéricos da dinâmica de Langevin e comparações com dados experimentais de partículas coloidais aprisionadas opticamente.

Palavras-chave: Termodinâmica. Pinça óptica. Tecnologias quânticas.

Referências:

1 MARTINS, T. T. **Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos**. 2019. Dissertacao (Mestrado em Ciencias) - Instituto de FIsica de Sao Carlos, Universidade de São Paulo,Sao Carlos,2019. DOI: 10.11606/D.76.2019.tde-12092019-141442

103

IC56

Desenvolvimento de algoritmos de reconstrução de fase para microscópio óptico sem lentes

OLIVEIRA, N. P.[1]; D'ALMEIDA, C. P.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]

nataliaportes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O desenvolvimento da microscopia foi fundamental para o progresso da ciência no que diz List item respeito ao estudo das estruturas microscópicas, bem como no entendimento das dinâmicas que ocorrem nessa escala. Posto que os microscópios se propõem a exceder as limitações da visão humana, o manejo e exploração dessa técnica é tido, por si só, como uma ciência. Dentre os diversos modelos existentes, os microscópios ópticos holográficos sem lentes vieram como uma alternativa aos microscópios ópticos tradicionais, isso foi propício graças à holografia digital impulsionada pelas evoluções na computação. Além de possibilitarem uma instrumentação simples, os microscópios ópticos holográficos sem lentes proporcionam um campo de visão superior por conseguirem desacoplar a relação entre a área observada e a resolução do sistema. A aplicação dessa técnica para a microscopia demanda processamentos de imagens com o intuito de reconstruir os hologramas adquiridos. Contudo, assim como os sistemas ópticos tradicionais, os digitais também apresentam o problema da perda de fase, uma limitação física proveniente dos sensores (ou filmes fotográficos) que impossibilitam a captação de toda a informação do campo elétrico da luz, fazendo-se necessária uma reconstrução numérica da fase que foi perdida. Para tal finalidade, esse projeto implementou dois métodos computacionais na linguagem de programação Python. O primeiro sendo o método "Multialturas", onde diferentes hologramas de uma mesma amostra são obtidos com múltiplas distâncias amostra-sensor. Esses hologramas são então usados como entrada no algoritmo que usa o valor de intensidade dos hologramas de cada plano, diferentes distâncias adquiridas, para calcular o valor de fase.(1) Já no "Multiespectral", hologramas obtido com a iluminação em diferentes comprimentos de onda são usados para que a partir de uma média envolvendo os valores experimentais, se calcule uma fase.(2) Os processamentos utilizados necessitam de um valor preciso do foco da imagem e, por isso, também foi implementada uma rotina computacional para o cálculo do foco, que antes era feito de forma manual.(3)Os dois métodos conseguiram ser implementados nos protótipos em desenvolvimento no grupo de pesquisa. Os processamentos foram feitos com imagens de um alvo padrão USAF-1951 e, também, de uma cultura de células. A resolução do sistema é de aproximadamente $4\mu m$ com um campo de visão aproximado de $30mm^2$.

Palavras-chave: Óptica. Processamento de imagem. Microscopia holográfica.

Referências:

1 GREENBAUM, Al.; 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. 2 ALLIER, C. *et al*. Imaging of dense cell cultures by multiwavelength lens [U+2010] free video microscopy. **Cytometry Part A**, v. 91, n. 5, p. 433-442, 2017. 3 TAMAMITSU, M. *et al*. **Comparison of Gini index and Tamura coefficient for holographic autofocusing based on the edge sparsity of the complex optical wavefront**. 2017. Disponivel em: arXiv:1708.08055v.1. Acesso em: 25 junho 2021

IC57

Um estudo das teorias de espalhamento eletromagnético no limite mesoscópico

SOUSA, D. B.[1]

davibessa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O fenômeno do espalhamento eletromagnético explica desde a coloração do céu e de colóides metálicos à aparição de forças em corpos iluminados. A resolução analítica desse problema é conhecida para os mais diversos materiais dos mais diferentes formatos, mas apenas para dois limites: quando o corpo espalhador é muito maior do que o comprimento de onda da luz incidente (limite geométrico), ou quando é muito menor (limite de Rayleigh). Para corpos entre esses dois limites, são necessárias teorias analíticas mais rebuscadas, e muitas vezes apenas a análise numérica pode explicar os efeitos observados. Neste trabalho, temos como objetivos estudar mais a fundo os modelos de espalhamento mesoscópico, analisando e desenvolvendo métodos analíticos para corpos de diferentes geometrias, focando em teorias já conhecidas de espalhamento por corpos esféricos (1) e cilíndricos. (2) Estudamos também como o método da Matriz de Transição pode ser usado para quantificar este fenômeno numericamente.

Palavras-chave: Espalhamento eletromagnético. Teoria de Mie. Matriz T.

Referências:

1 HERGERT, W.; WRIEDT, T. **The Mie theory:** basics and applications. Berlim: Springer Verlag, 2012.

2 WAIT, J. R. Scattering of a plane wave from a circular dielectric cylinder at obliqueincidence. **Canadian Journal of Physics** , v. 33, n.5, p. 189–195, 1955.

IC58

Estudo de formação de coronas de surfactante pulmonar e mucina em nanopartículas de sílica em condições de hiperinflamação

PEDRIZ, I. S.[1]; FERREIRA, L. M. B.; ZUCOLOTTO, V.[1]; ESTEVAO, B. M.[1]

igorspedriz@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A aplicação de SiNPs para alguns tratos tem o muco como a primeira barreira a ser transposta, esse é composto principalmente pela proteína mucina, além de lipídeos, carboidratos e água. Recentemente um estudo apontou que a mucina encontrada no TGI é capaz de se adsorver à superfície de partículas, formando uma corona proteica capaz de alterar o processo de internalização celular.(1) Como a maioria dos estudos sobre corona proteica está centrado na influência da albumina, proteína no plasma sanguíneo, a possibilidade de formação de corona de mucina abre uma nova frente de pesquisa, ainda pouco explorada. Ao se tratar da mucosa pulmonar, além do importante revestimento do muco há um outro composto muito importante, o surfactante pulmonar, que visa diminuir a tensão superficial alveolar e evitar o colapso dos mesmos ao expirarmos. Este líquido surfactante é formado por algumas proteínas e majoritariamente por fosfolipídeos.(2) O muco e surfactante pulmonar podem estar significativamente alterados em condições de hiperinflamação pulmonar, característica das manifestações mais graves da COVID-19.(3) As células desta região são responsáveis pela síntese e reciclagem de surfactante pulmonar, a hipótese de que o metabolismo dos mesmos possa estar alterado é factível. Em resumo, interações com mucina e surfactante pulmonar com sistemas nanoparticulados projetados para o tratamento da COVID-19 são prementes no momento atual. A formação de coronas de mucina das vias aéreas e do surfactante DPPC na superfície de SiNPs modifica a superfície da mesma, alterando respostas biológicas importantes em terapias pulmonares. Mais especificamente, o conhecimento gerado a partir destes estudos poderá esclarecer questões de como propriedades de absorção e/ou excreção de fármacos carreados por SiNPs podem ser modulados na presença de corona biomolecular. As SiNPs sem sonicação (SS) apresentam um tamanho médio maior, assim como o índice de polidispersividade, quando comparadas com as SiNPs com sonicaçao (CS) nas mesmas concentrações. Quando analisamos separadamente e tratamos apenas do efeito da dispersão em diferentes concentrações, percebe-se que para as SiNPs (SS), apesar da pequena diminuição do tamanho, não há uma influência considerável, nem para o tamanho nem para o potencial zeta, estando no limite da instabilidade e com alta do PdI. Quanto as SiNPs (CS), essas já apresentam uma distinção maior quanto ao tamanho, tendo esse diminuído, e já se enquadram entre as dispersões com certa estabilidade. No geral, as SiNPs com modificações, amino e ciano, apresentaram uma transição de moderadamente para altamente polidispersas e se enquadraram acima do valor considerado como moderadamente estáveis. Logo, o aumento ou diminuição da magnitude do ZP tende a manter uma relação inversamente proporcional com o tamanho médio das SiNPs. Quanto as SiNPs-COOH, essas demonstraram características interessantes, manteve todos os valores estudados dentro do erro estatístico.

Palavras-chave: Nanopartículas de sílica. Trato respiratório. Hiperinflamação. COVID-19. Muco. Mucina.

Referências:

106

1 YANG, D. *et al* Intestinal mucin induces more endocytosis but less transcytosis of nanoparticlesacross enterocytes by triggering nanoclustering and strengthening the retrograde pathway. **ACS Applied Materials Interfaces** v.10, n.14,p.11443–11456,2018.
2 HIDALGO, A.; CRUZ, A.; PÉREZ-GIL, J. Pulmonary surfactant and nanocarriers: toxicity versus-combined nanomedical applications. **Biochimica et Biophysica Acta** :biomembranes,v.1859, n.9, p.1740–1748,2017.
3.LOZADA-REQUENA, I.; NÚÑES PONCE, C. COVID-19: respuesta inmune y perspectivas terapéuticas. **Revista Peruana de Medicina Experimental y Salud Publica**v. 37, n.2,p.312–319,2020.

107

IC59
A cristalografia no dia a dia

MILITAO, L.[1]; ELLENA, J.[1]
lucas.milito@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste projeto serão apresentadas diferentes facetas da cristalografia as quais são amplamente observáveis. Primeiramente, a cristalografia estrutural, estudada no Laboratório Multiusuário de Cristalografia Estrutural (LaMuCrEs), do qual faço parte, possui uma ampla utilidade prática. Desde a dureza de lâminas metálicas até a biodisponibilidade de fármacos, a estrutura cristalina interfere em diversas propriedades do material em questão. Nesse sentido, é impossível abordar a Física do estado sólido sem mencionar estruturas cristalinas. No laboratório, para identificar essas estruturas são utilizados difratômetros de raio x. Esses equipamentos geram raio x e analisam os padrões de difração que as estruturas cristalinas geram. Desse modo é possível determinar a cela unitária(1) de um cristal e suas características estruturais correspondentes. Com a obtenção de informação estrutural de um material sólido por meio de operações de simetria é possível remontar o cristal inteiro a partir da sua unidade assimétrica, seu grupo espacial e seus parâmetros de cela. Nesse projeto, serão apresentados os princípios por trás de sólidos cristalinos, o método de análise em laboratório e exemplos práticos de sua utilização na indústria.

Palavras-chave: Cristalografia. Física do estado sólido. Espectroscopia Raman. Difração de raio X. Sólidos cristalinos.

Referências:

1 HOFFMANN, F. The concept of the unit cell.*In*:HOFFMANN, F.**Introduction to crystallography**. New York: Springer International, 2020. p.14.

108

IC60
Aprendizagem de máquina em sistemas quânticos

VASCO, B.[1]; MUNIZ, S. R.[1]
brvasco@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Recentemente, técnicas de aprendizado por reforço têm sido aplicadas com relativo sucesso em problemas de controle quântico. (1) Neste trabalho, temos o objetivo de aplicar a técnica de aprendizado profundo por reforço na versão quântica do conhecido problema do pêndulo invertido (ou cartpole). Nesta versão do problema, proposta por Wang, Ashida e Ueda (2), um ambiente é construído à partir de uma partícula em um potencial instável, como o de um oscilador harmônico invertido e uma força estabilizadora que é definida como a ação no algoritmo de controle do sistema. Assim, o objetivo do processo de aprendizado é determinar a força necessária para manter a partícula numa região delimitada e conservar o sistema em equilíbrio dinâmico pelo maior tempo possível. Esperamos, ao aplicar a mesma técnica em outros modelos de potenciais, comparar resultados com outros modelos de controle dinâmico e estudar a possibilidade de implementá-la no controle de um sistema quântico real no laboratório, por exemplo, usando qubits de spin em centros nitrogênio-vacância (NV) em diamante.

Palavras-chave: Controle quântico. Aprendizado por reforço. Aprendizado de máquina.

Referências:

1 NIU, M.Y. *et al.* Universal quantum control through deep reinforcement learning. **npj Quantum Information** , v. 5, p. 33, 2019. DOI: 10.1038/s41534-019-0141-3.
2 WANG, Z. T.; ASHIDA, Y.; UEDA, M. Deep reinforcement learning control of quantum cartpoles. **Physical Review Letters**, v. 125, n. 10, p. 100401, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.100401.

109

IC61
Redes neurais aplicadas ao estudo de dinâmica estocástica

MIRALHAS, V.[1]; MUNIZ, S. R.[1]
vinicius.miralhas@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Machine Learning (ML), uma das especializações da área de estudos de inteligência artificial, analisa o estudo de algoritmos capazes de extrair (e posteriormente aplicar) a estrutura e informação subjacentes de um fornecido conjunto de dados. *Deep Learning* (DL), proeminente subárea de ML, aborda a construção de modelos de redes neurais auto-instruídas a tomar decisões de alta precisão a partir da análise prévia de um conjunto de dados. DL tem demonstrado a sua relevância em âmbitos variados, desde a área médica, com o diagnóstico de enfermidades de um paciente, à sismologia, com a supressão de ruídos externos em uma amostra de dados de abalos sísmicos. (1) A aplicação de DL à análise de sistemas físicos inerentemente estocásticos, regidos por equações diferenciais estocásticas (*stochastic differential equations*, SDEs), pode ser uma alternativa computacionalmente mais eficiente em relação aos métodos usuais de resolução numérica destes mesmos sistemas. (2) Neste trabalho, apresentam-se os conceitos e o estágio atual de um projeto de pesquisa que visa implementar uma solução por redes neurais do sistema físico referente ao movimento browniano de uma partícula coloidal aprisionada por pinças ópticas (3), cuja SDE é matematicamente modelada pela dinâmica de Langevin. Utilizando bibliotecas de treinamento de redes neurais em *Python*, como *Tensorflow* e *Keras*, objetiva-se averiguar a eficácia das redes neurais em resolver o sistema estocástico quando comparadas aos métodos tradicionais de diferenças finitas, que foram implementados na referência. (3)

Palavras-chave: Pinças ópticas. Deep learning.

Referências:

1 TANAKA, A.; TOMIYA, A.; HASHIMOTO, K. **Deep learning and physics**. Singapore: Springer, 2021. 2 MARTINS, T. T. **Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos.** 2019. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019. DOI: 10.11606/D.76.2019.tde-12092019-141442. 3 GÜLER, B.; LAIGNELET, A.; PARPAS, P. **Towards robust and stable deep learning algorithms for forward backward stochastic differential equations**. 2019. Disponível em: https://arxiv.org/pdf/1910.11623.pdf. Acesso em: 19 jun. 2021.

IC62

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

MOYSÉS, R.[1]; MISOGUTI, L.[1]

renatomaframoyses@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os estudos na área de óptica não linear têm crescido de maneira significativa nas últimas décadas, gerando aplicações em fotônica para o desenvolvimento de novas e mais eficientes tecnologias, como em telecomunicações, no processamento de dados e na transmissão de informações. A possibilidade da utilização de lasers sintonizáveis operando com pulsos ultracurtos (dezenas de femtossegundos) incentiva a caracterização de novos materiais, sendo necessário estudo das características ópticas lineares e não lineares desses para maior compreensão da interação luz-matéria. O enfoque deste trabalho é a determinação dos espectros de refração e absorção não lineares de soluções de corantes a partir das medidas da rotação não linear da polarização elíptica (RNLPE). Essas medidas demonstraram grande rapidez e eficiência, comparadas à tradicional técnica de Varredura-Z, por possuírem, no regime de forte focalização, a vantagem de serem autorreferenciadas em varredura única. (1) Foram caracterizados, a partir da utilização de uma cubeta de sílica (referência), quatro corantes: Disperse Red 13 (DR13), Disperse Red 1 (DR1), Disperse Red 19 (DR19) e Disperse Orange 3 (DO3), dissolvidos em dois solventes diferentes, metanol e acetona, todos na concentração de 0,01 mol/L. Essas soluções apresentaram resultados convincentes em relação aos seus espectros de refração e absorção não lineares. Os de refração, resultados inéditos, mostraram-se interessantes por possuírem diferentes comportamentos para os valores do índice de refração não linear (n2) conforme o comprimento de onda era variado. Levando em conta o valor de n2 dos solventes para diferentes comprimentos de onda (2), foi possível subtrair a contribuição do metanol e da acetona no n2 das soluções e determinar em primeira análise o valor de n2 bruto para os corantes (solutos). Grosso modo, os solutos possuem comportamentos similares, com intervalos onde seus n2 são positivos, negativos ou aproximadamente nulos (em relação a sílica) conforme o comprimento de onda varia, com a acetona acentuando mais as não linearidades dos corantes do que o metanol. Também foram determinados os espectros de absorção não linear, podendo ser observada com clareza a banda de absorção de dois fótons de cada solução, já explorada em outros trabalhos (3), e a semelhança entre as curvas dos valores de coeficientes de absorção não linear (β) das quatro soluções de corantes. Os valores de n2 e β de cada corante também apresentaram correlação, permitindo maior entendimento das não linearidades do material. Em conclusão, a técnica de medidas RNLPE é extremamente eficiente para a caracterização de soluções de corantes e seu estudo pode ser estendido para outros diferentes corantes em diferentes solventes, já que os resultados motivam a obtenção de novas medidas para determinação de modelos para o comportamento teórico (*fitting* das curvas) de ambos espectros para as soluções.

Palavras-chave: Óptica não linear. Pulsos ultracurtos. Rotação não linear da polarização elíptica.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L.*et al*. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick samples. **Applied Physics B**: laser and optics, v. 120, p. 653-658, 2015. DOI: 10.1007/s00340-015-6178-x.

2 MELHADO, M. S. *et al*. Absolute nonlinear refractive index spectra determination of organic molecules in solutions. **Journal of Physical Chemistry. A**, v. 123, n. 4, p. 951-957, 2019. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b10984
3 DE BONI, L. *et al*. Degenerate two-photon absorption spectra in azoaromatic compounds. **Chemphyschem**, v. 6, n. 6, p. 1121, 2005. DOI: 10.1002/cphc.200400391

112

IC63

Análise de retenção de introns mínimos em câncer de próstata

SANTOS, J. P. C.[1]; ZUVANOV, L.[1]; AMBRÓSIO, A. L. B.[1]

joao.cassucci@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Retençoes intrônicas são uma forma de splicing anormal que se caracteriza pela permanência de íntrons em sequências de RNA mensageiros pós-splicing. Este fenômeno é bem caracterizado em plantas e fungos e só agora está sendo bem estudado em mamíferos, incluindo seres humanos. (1) Este trabalho teve como objetivo estudar este fenômeno em íntrons mínimos de transcritos de células de câncer de próstata. Foi utilizado o mapeamento de dados de RNA-Seq de amostras de câncer de próstata e também de células saudáveis disponíveis em bancos públicos no genoma humano. A partir destes mapeamentos utilizou-se a metodologia já descrita para calcular o parâmetro IRratio, que reflete a proporção de transcritos apresentando retenção do intron em relação ao número de transcritos totais (intrônicos e exônicos).(2) Buscou-se correlacionar os valores de retenção intrônica com diferentes parâmetros relativos a progressão e agressividade dos canceres, além de termos de ontologia de genes para averiguar se há uma relação entre retenção e função gênica. Também foram utilizados testes como Mann-Whitman-Wilcoxon e Qui quadrado para deixar claro se o fenômeno de retenção de introns minimos é significativo no câncer.

Palavras-chave: Bioinformática. Íntrons. Câncer.

Referências:

1 GE,Y.; PORSE,B.T. The functional consequences of intron retention: alternative splicing coupled to NMD as a regulator of gene expression.**BioEssays**, v. 36, n. 3, p. 236–243, 2013. 2 MIDDLETON,R.*et al*. IRFinder: assessing the impact of intron retention on mammalian gene expression. **Genome Biology**, v. 18, n. 1, p. 51, 2017.

IC64

Integração do framework pymr com o ambiente integrado de desenvolvimento spyder e sua adaptação à projetos de ressonância magnética

CORREIA, D. S.[1]; TANNÚS, A.[1]

dacorriea@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Ressonância Magnética (RM) esteve sempre à frente das ferramentas de análise e diagnóstico por suas características não-invasiva e não-destrutiva do objeto em estudo. Recentes pesquisas em diversas áreas, como a de agronomia (1), estão trazendo tal tecnologia de forma mais acessível e portátil e que necessita de flexibilidade para que os pesquisadores possam adaptá-las às suas necessidades. O desenvolvimento de novos métodos de ressonância magnética, como o FREE(2), exige atualmente o avanço e a flexibilidade não encontrados em equipamentos comerciais, gerando demanda para o desenvolvimento realizado dentro deste escopo. O objetivo deste projeto é integração do PyMR framework(3) que auxilia a programação, gerenciamento de equipamentos e criação de interfaces com o ambiente de desenvolvimento Spyder onde deverão ser gerados os plug-ins, oferecendo maior suporte e agilidade ao pesquisador. Os plug-ins integrados ao Spyder têm a função de auxiliar o pesquisador com tarefas repetitivas ou que possam ser programadas, acelerando o processo de desenvolvimento. Dentre as tarefas específicas dos editores para novos tipos de dados, temos as tabelas de codificação de fase para sequências de pulsos de ressonância magnética, vetores e matrizes com edição e visualização gráfica. Todo o framework PyMR, assim como os plug-ins, serão suportados por técnicas atualizadas de programação que geram uma API capaz de ser integrada com outras ferramentas externas como simuladores e bibliotecas científicas. As versões preliminares já estão em uso nos sistemas de RM locais e com colaboradores internacionais.

Palavras-chave: Python magnetic resonance framework. Espectrômetro digital de RM. Spyder IDE

Referências:

1 COLNALGO, L. A. *et al.* Why is Inline NMR rarely used as industrial sensor? challenges and opportunities. **Chemical Engineering Technology**, n.37, p.191–203, 2014. DOI:10.1002/ceat.201300380 2 TORRES, E. *et al.* B1-gradient based MRI using Frequency-modulated Rabi Encoded Echoes (FREE). **International Society for Magnetic Resonance in Medicine**, 2021. No prelo. 3 PIZETTA, D.C. **PyMR**: um framework para programação de sistemas de ressonância magnética. 2018. 130 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

IC65

Desenvolvimento de interface gráfica com o usuário para microscópio sem lentes holográfico

CARVALHO, F. A.[1]; PRATAVIEIRA, S.[2]; GARCIA, M. R.[2]; D'ALMEIDA, C. P.[2]

carvalhofelipe.carvalho@usp.br

[1]Universidade de São Paulo

[2]Instituto de Física de São Carlos - USP

A microscopia sem lentes tem mostrado grande potencial para o desenvolvimento de sistemas de imageamento compactos, e com amplo campo de visão, sem diminuir a resolução do sistema óptico.(1) Dentre as diferentes técnicas para imageamento holográfico, destaca-se a técnica de holografia denominada in-line, no qual a fonte de luz, assim como a amostra e o sensor digital para captura de imagens encontram-se alinhados. Dessa forma, é obtido uma independência entre a resolução e o campo de visão.(2) Para a obtenção das imagens digitais visando a reconstrução dos valores de fase presentes na informação de intensidade gravada nos hologramas, destaca-se a técnica denominada multialturas. O método consiste na aquisição de imagens em diferentes planos de distância entre a amostra e o sensor, em que a altura é variada pela movimentação de um atuador motorizado de transladação conectado a um servomotor. O objetivo deste trabalho foi desenvolver uma interface gráfica do usuário para controle de um microscópio sem lentes holográfico in-line, com método de aquisição multialturas, para monitoramento de culturas celulares. A interface de controle foi desenvolvida em linguagem Python através da biblioteca Tkinter, no qual é responsável pela correta integração e automatização do atuador motorizado conectado ao servomotor, juntamente com a aquisição de imagens pelo sensor digital, para que o método multialturas seja empregado de maneira assertiva. Além da automatização do processo de aquisição dos hologramas, a interface desenvolvida permite uma melhor visualização dos processos em tempo real, disponibilizando ao usuário todos os valores e resultados de cada procedimento realizado, permitindo uma melhor interação entre usuário e instrumentação. O algoritmo já é capaz de realizar a aquisição das imagens em multialturas de maneira automatizada entre os equipamentos do sistema, além de realizar rotinas de aquisição de imagens com temporizador entre cada iteração, mostrando ao usuário todos os valores e resultados obtidos em cada procedimento. A imagem do sensor digital é mostrada em tempo real para o usuário, assim como as imagens em multialturas são salvas para futuro processamento e recuperação de valores de fase e amplitude.

Palavras-chave: Microscopia.Instrumentação óptica. Programação.

Referências:

1 KIM, S. B. *et al.* Lens-free imaging for biological applications. **Journal of Laboratory Automation**, v.17, n.1,p.43-49,2012.

2 D'ALMEIDA C. D. P.; PRATAVIEIRA, S. **Desenvolvimento e caracterização de um microscópio óptico holográfico sem lentes in-line**. 2018.76p. Dissertação (Mestrado em Ciencias) - Instituto de Fisica de Sao Carlos, Universidade de São Paulo, Sao Carlos,2018.

IC66

Desenvolvimento de sistema de iluminação LED RGB para microscópio sem lentes holográfico

KURAMOTO, C. Y.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]; D'ALMEIDA, C. P.[1]; GARCIA, M. R.[1]

cesaryk@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A microscopia sem lentes tem possibilitado o desenvolvimento de sistemas de aquisição de imagem compactos e com amplo campo de visão, sem comprometer a resolução do sistema. (1-2) O presente trabalho aborda o desenvolvimento de um sistema de iluminação LED multiespectral (RGB) construído para um microscópio sem lentes holográfico multiespectral. Buscou-se desenvolver um circuito para alimentação dos LEDs capaz de ser ligado e desligado remotamente, via controle USB. Para tanto, utilizou-se uma placa de desenvolvimento para controle do circuito de alimentação dos LEDs, e três circuitos de controle de corrente, controlados por estímulos PWM (do inglês, Pulse Width Modulation) da placa de controle. Foi desenvolvido tanto o circuito que controla a corrente nos LEDs, quanto o firmware a ser gravado em na pequena placa de desenvolvimento com comunicação USB, para controle do circuito via software. Desse modo, o software que controla o microscópio é capaz de enviar sinais de comunicação ao circuito de controle, para acender ou apagar todos os LEDs, além de regular seu brilho. Procurou-se desenvolver um sistema o mais compacto possível, para atender a demanda de um microscópio compacto, com placas de circuito impresso de aproximadamente 4 cm x 4 cm, e uma placa de controle de 3,3 cm x 1,8 cm, contendo o microcontrolador. Foi possível prototipar o circuito de regulação da corrente, o qual respondeu bem aos estímulos de PWM para controle da corrente nos LEDs. Também foi possível desenvolver algumas linhas de código capazes de se comunicarem com a placa de controle, para ligar e desligar cada um dos LEDs, utilizando-se a linguagem Python, através da biblioteca PySerial. Para trabalhos futuros, pretende-se integrar o projeto desenvolvido ao sistema de microscopia sem lentes holográfico.

Palavras-chave: Microscópio holográfico. LED RGB. Placa de controle.

Referências:

1. KIM, S. B. *et al.* Lens-free imaging for biological applications. **Journal of Laboratory Automation**, v. 17, n. 1, p. 43-49, 2012.
2. D'ALMEIDA C.. P. **Desenvolvimento e caracterização de um microscópio óptico holográfico sem lentes in-line**. 2018. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

IC67
Armadilha bidimensional para gases atômicos degenerados

CHIARELLI, M.
matheuspolichiareli@hotmail.com

Objetivos:O objetivo deste projeto de iniciação científica é simular os potenciais bidimensionais arbitrários produzidos por um feixe de laser com perfil de intensidade modulado por um "spatial light modulator" (SLM) e sujeitos à uma resolução óptica finita a fim de aprisionar gases atômicos ultrafrios.Métodos e Procedimentos:Sistema óptico real: O sistema óptico consiste no uso de um DMD ("digital micromirror device") para a criação do potencial idimensional arbitrário. O DMD é em um conjunto de micro-espelhos que, a partir de um controle individual (ligado ou desligado) altera o perfil de intensidade de um feixe refletido. A configuração usada será a de "imagem direta" (1), na qual o perfil impresso no DMD é o mesmo que será criado no plano atômico. Os feixes de luz possuem frequência voltada para o azul da transição atômica, dessa forma os átomos são aprisionados nas regiões escuras (mínimos de intensidade).Além disso, há um conjunto de telescópios, responsável por uma demagnificação da imagem do DMD, e uma lente objetiva microscópica.Devido às dimensões finitas dos componentes ópticos utilizados, o sistema possuirá uma resolução óptica finita. A resolução óptica de um sistema real está ligada com a capacidade deste sistema em resolver detalhes da imagem que está sendo projetada e como as dimensões são finitas, parte da informação do objeto será perdida no momento em que sua imagem for projetada Simulação: A simulação deste procedimento será feita da seguinte maneira: O DMD é representado por uma matriz que contém apenas os valores 0 (desligado) e 1 (ligado),simulando assim cada um de seus microespelhos. A resolução óptica do sistema é simulada através de uma função gaussiana e seu efeito no experimento é quantificado através da convolução entre esta função gaussiana e a imagem do DMD.Resultados:Focou-se, primeiramente, no potencial bidimensional do tipo "caixa" pois, além da maior simplicidade na produção de potenciais deste tipo, ele é de fácil comparação com as previsões teóricas esperados para o comportamento dos átomos. O potencial "caixa" consiste num potencial que possui valores 0 numa determinada região (onde os átomos serão aprisionados) e não nulo fora desta região, com bordas abruptas.O efeito da resolução óptica finita do sistema é, justamente, atenuar estas bordas abruptas do potencial conferindo a eles um tamanho característico. Isso fará com que os átomos não fiquem exatamente contidos nesta região delimitada.O intuito é realizar um potencial do tipo "caixa" com as bordas mais abruptas possível mas temos estas limitações experimentais. Foi possível verificar o efeito que o aparato experimental terá nos resultados finais do projeto. Iremos trabalhar com [U+1D6FE] =1 μm, o que nos dá uma largura do potencial de aproximadamente 0.33 μm, mantendo assim a característica de um potencial do tipo "caixa".Conclusões:Foi possível simular o potencial do tipo "caixa" e avaliar os efeitos da resolução óptica neste potencial. Para a resolução óptica estimada do sistema experimental encontramos um tamanho de borda de 0.33 μm, dessa forma, a dinâmica dos átomos aprisionados neste potencial não é alterada significativamente.

Palavras-chave: Gases degenerados. Potencial arbitrário. DMD.

Referências:

1 VILLE, J. L.*et al.* Loading and compression of a single two-dimensional bose gas in na optical accordion. **Physical Review A**, v. 95, n.1,p.01363,2017.

117

IC68

Desenvolvimento de um sistema ótico de oftalmoscópio adaptado ao smartphone

CASTRO NETO, J. C.[1]; MACHADO, S.; YASUOKA, F.[1]

jarbas@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Desenvolvimento de um sistema óptico de um oftalmoscópio (1) para adaptação a smartphones e substituição da lente 20D, de superfície não-esférica, por um conjunto de lentes esféricas a fim de baratear o custo de produção, e possibilitar a reprodução no país. O sistema óptico de iluminação e captura de imagem será desenvolvido com propósito de ser integrado a smartphones utilizando tecnologia de impressão 3D. Este dispositivo visa a popularização da técnica de oftalmoscopia direta (2) adaptado a smartphones para o atendimento dos profissionais de saúde às comunidades mais carentes. Métodos e Procedimentos: O dispositivo de adaptação da iluminação do próprio smartphone e o conjunto de lentes esféricas será desenvolvido por meio do software Zemax OptcStudio®, com as mesmas características como campo de visão, ampliação da imagem, distância de trabalho e outras características fundamentais das lentes padrões de 20D, cuja superfície frontal é anesférica, de forma que os parâmetros otimizados acoplem à grande maioria de tipos de smartphones. A parte mecânica será realizada utilizando o software Solidworks®, de forma que o dispositivo mecânico desenvolvido fará a integração do sistema óptico de iluminação e o conjunto de lentes com um smartphone, a fim de se obter um sistema oftalmoscópio direto acoplado a smartphone. Usando a tecnologia de impressão 3D toda a parte óptica e mecânica do projeto será integralizado e o protótipo será montado nos laboratórios do IFSC.Resultados:O objetivo é obter um modelo portátil, leve e de baixo custo de um oftalmoscópio direto, que se adapta a smartphone e permite a realização de análises em alta resolução da retina, facilitando o exame e tornando-o mais confortável e registrável.Conclusões:É possível tornar a oftalmoscopia direta mais popular através de um aparelho de baixo custo utilizando tecnologia de impressão 3D e o conjunto de lentes esféricas. Além disso, é nitidamente mais dinâmico realizar exames com auxílio de uma tela de celular.

Palavras-chave: Oftalmoscópio. Óptica. Oftalmoscopia direta.

Referências:

1 TIMBERLAKE, George *et al.* **The direct ophthalmoscope how it works and how to use It**. Kansas: University of Kansas Medical Center,2005.

2 VIEIRA SILVA, J.; FERREIRA, B.; PINTO H. S. **Princípios da oftalmologia:**avaliacao oftalmologica.Fortaleza: Universidade Federal de Fortaleza, 2013.

IC69

Estudos ópticos espectroscópicos em tiofenil-porfirinas: uma possível aplicação em microbiologia.

FRANCA, D.[1]; BONI, L.[1]

diegofdeoliveira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O intuito do projeto é o estudo e caracterização de propriedades ópticas em moléculas orgânicas. As moléculas iniciais de estudo foram um trio de porfirinas com grupos laterais tiofeno. É feita uma solução com as amostras em solvente Dimetilsulfóxido(DMSO), um solvente biológico amplamente utilizado em métodos medicinais como terapia foto dinâmica e interação com DNA. No entanto, a solubilização das amostras não foi eficiente, com formação de agregados e presença de precipitados, que podem alterar as medidas ópticas realizadas. Isso dificulta o estudo das moléculas visto que as propriedades caracterizadas deste tipo de solução não irão corresponder às características da forma monomérica de interesse. Para tentar contornar este problema foi feita também solução em dimetilformamida(DMF), no entanto o resultado foi o mesmo. Foram obtidos os espectros de absorção e fluorescência das porfirinas, apesar da baixa confiabilidade destes.O problema com as amostras levou à opção de troca das moléculas de estudo, já que as primeiras utilizadas não apresentaram boa solubilização e possuíam sinais de contaminação, provavelmente decorrente de problemas de síntese com as mesmas. O estudo então obteve um grupo de corroles como novas moléculas de interesse. As quatro moléculas foram utilizadas para preparo de soluções no solvente DMSO com o intuito de realizar a caracterização neste meio.(1-2) O estudo agora busca obter os espectros de absorção e fluorescência dos novos corroles e, posteriormente, a análise de seus tempos de vida de fluorescência, eficiência quântica de fluorescência e estudos ópticos não-lineares. O tempo de vida de fluorescência da molécula corresponde ao intervalo de tempo que este processo de emissão leva para ocorrer, enquanto a eficiência quântica corresponde à fração da energia absorvida que é liberada por fluorescência. Uma vez que uma molécula absorve energia na forma de luz, diversos são os mecanismos pelos quais esta será liberada. A forma como os diferentes processos de transferência de energia ocorrem é essencial para o entendimento da interação desta molécula com outros compostos e para a determinação de uma possível aplicação desta.Uma vez caracterizadas as moléculas quanto a estas propriedades, pretende-se estudar suas interações com moléculas biológicas como DNA e Proteínas. Estas interações podem ser observadas por meio de técnicas ópticas, ao detectar alteração nas propriedades de fluorescência medidas na molécula isolada. A alteração destes parâmetros quando em contato com outras moléculas indica a existência de novos mecanismos de dissipação de energia e, portanto, implica a presença de interação entre o corrole e a molécula orgânica.(3)

Palavras-chave: Espectroscopia. Óptica linear. Moléculas orgânicas.

Referências:

1 SHIVAPRASADACHAY, B; RAMYA, A. R.; REDDYAND, G.; GIRBABU,L. Light induced intramolecular energy and electron transfer events in carbazole–corrole and phenothiazine-corrole dyads.**Journal of Porphyrins and Phtlalocyanines,**v.24,n.5-7,p.693-704,2020.

2 KANDHADI,J. *et al.* trans-A2B-corrole bearing 2,3-di(2-pyridyl)quinoxaline (DPQ)/phenothiazine moieties: synthesis, characterization, electrochemistry and photophysics, **New Journal of Chemistry,**v.42,p.9987-9999,2008.

119

3 CERULLO, G. *et al.* Time-resolved methods in biophysics. 4. Broadband pump-probe spectroscopy system with sub-20 fs temporal resolution for the study of energy transfer processes in photosynthesis. **Photochemical Photobiological Sciences**, v.6, n.2, p.135-144,2007.

120

IC70

Monitoramento da resposta fotodinâmica empregando um sistema de imagem de campo amplo por fluorescência no infravermelho próximo.

COSTA, G. F.[1]; KURACHI, C.[1]; GARCIA, M. R.[1]; MARTINELLI, L. P.[1]

gustavofernandesdc@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

De acordo com o INCA (Instituto Nacional do Câncer), o câncer de pele é o mais frequente entre os tipos de câncer, já que este representa 30% dos casos. O melanoma se destaca por ser o mais grave, já que apresenta uma alta tendência de se espalhar para o restante da pele e para outros órgãos. Porém, sua ocorrência é baixa. No Brasil, o melanoma representa apenas 3% dos casos de câncer de pele, e no cenário mundial, é responsável por 5% dos casos, mas com altas taxas de mortalidade, representando de 80% a 85% de todas as mortes causadas por câncer de pele. (1) Porém, ultimamente, com o aumento dos casos de melanoma, é necessário desenvolver técnicas de diagnóstico e tratamento mais eficazes, que sejam de preferência, menos invasivos do que o método cirúrgico atualmente empregado. Uma alternativa é a terapia fotodinâmica, que já vem sendo utilizada para tratar diversos tipos de câncer, e como se trata de um método não invasivo, ela pode se tornar uma boa alternativa para o tratamento do melanoma, já que pode ser realizada em ambulatórios, proporcionando um tratamento mais barato em com um melhor resultado estético. Assim, nesse estudo, estão sendo desenvolvidos programas em Python para realizar o processamento de imagens de fluorescência de tumores de pele do tipo melanoma durante o tratamento com a terapia fotodinâmica.

Palavras-chave: Melanoma. Tratamento. Terapia fotodinâmica. Imagens de fluorescência.

Referências:

1 PINHEIRO, A. M. C. *et al.* Melanoma cutâneo: características clínicas, epidemiológicas e histopatológicas no Hospital Universitário de Brasília entre janeiro de 1994 e abril de 1999. **Anais Brasileiros de Dermatologia**, v. 78, n. 2, p. 179-186, mar./abr. 2003.

IC71

Análise e classificação de plântulas de soja por meio do processamento digital de imagens e de inteligência artificial

PIMENTEL, L. P.; CASTRO NETO, J. C.[1]

lucaspp2305@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A agricultura é vital no desenvolvimento sócio-econômico de um país e a elaboração de sistemas com base em inteligência artificial tem ganhado espaço nessa área (1). No Brasil, segundo dados do Centros de Estudos Avançados em Economia Aplicada da Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz (CEPEA-ESALQ), a agropecuária foi responsável por 26,6% do PIB brasileiro em 2020 e a soja se destacou como uma das maiores safras nesse período (2). Diante disso, é válido ressaltar a importância de procedimentos para análise e classificação de plântulas de soja, a fim de estimar a qualidade de lotes de plântulas em período de germinação. Por isso, o presente projeto visa desenvolver um modelo que irá classificar as plântulas em normais, anormais e semente mortas para facilitar e padronizar esse procedimento, para os experimentos e a rotulação foi adotada a Regra de Análise de Sementes (RAS) (3). O diferencial dessa proposta é abordar o problema com modelos baseados em aprendizado profundo e, a partir das imagens dos lotes com plântulas, classificar cada plântula em sua respectiva classe. Dessa forma, essa pesquisa pode levar a construção de um sistema capaz de processar lotes com várias plântulas de maneira ágil e eficaz, e posteriormente estimar métricas referentes à qualidade do lote.

Palavras-chave: Plântulas de Soja. Inteligência Artificial. YOLO.

Referências:

1 SHARMA, A.; JAIN, A.; GUPTA, P.; CHOWDARY, V. Machine Learning applications for precision agriculture: a comprehensive review. **IEEE Access**, v.9, p.4843-4873, 2021, DOI: 10.1109/ACCESS.2020.3048415. 2 CEPEA. **PIB do agronegócio brasileiro em 2020**. Disponível em: https://www.cepea.esalq.usp.br/upload/kceditor/files/Cepea_CNA_relatorio_2020.pdf. Acesso em 17 junho 2021. 3 BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Secretaria de Defesa Agropecuária. **Regras para análise de sementes**. Brasilia:2009.

122

IC72

Diffusion-weighted magnetic resonance imaging: an approach using Langevin equation

ALVES, F.; PAIVA, F. F.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]

felipepereira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

In the present work, starting from Bloch's phenomenological model for nuclear magnetization and introducing a gradient magnetic field, we address the problem of molecular diffusion, in the normal diffusion regime, through the memoryless Langevin equation (LE) (1). The calculation was extended to anomalous diffusion case using a fractional generalization of the Langevin equation (GLE) (2). In both cases, the Gaussian signal approximation and the gradient echo pulse sequence (GRE) were used. The stochastic approach reproduces the classic result of the literature for the attenuation to Nuclear Magnetica Resonance (NMR) signal due to diffusion, $\left\langle e^{i\Delta\Phi}\right\rangle_GRE = \exp\left(-2\gamma^2 DG^2\tau^3/3\right)$, and is consistent with experiments (3).

Palavras-chave: Magnetic resonance imaging. Diffusion. Langevin equation.

Referências:

1 COFFEY, W.; KALMYKOV, Y. P. **The Langevin equation**: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering. Singapore: World Scientific, 2012. 2 LUTZ, E. **Physical Review E**, v. 64, n.5, p. 051106,2001. 3 COOKE, J. M. *et al.* **Physical Review E**, v.80, n.6, p.061102,2009.

IC73

Estudos ópticos espectroscópicos lineares e não lineares em uma nova classe de porfirinas

NASCIMENTO, C. S.; BONI, L.

carol_salgado@usp.br

A principal finalidade deste projeto é o estudo e caracterização espectroscópica de três porfirinas sintetizadas recentemente com a finalidade de serem usadas para aplicações em terapia fotodinâmica e microbiologia. As porfirinas em questão possuem quatro grupos ligantes de fluoreno ao redor do anel macrociclo e podem ser descritas como uma porfirina de base livre (H_2TFluorPor), uma possuindo um íon de zinco no interior do anel macrociclo (ZnTFluorPor) e uma com um íon de cobre também no interior (CuTFluorPor). Por serem inéditas, o estudo de suas propriedades espectroscópicas, utilizando técnicas espectroscópicas bem conhecidas, é extremamente importante para se determinar as possíveis aplicações destas em dispositivos, microbiologia e fototerapia dinâmica contra o câncer. (1) As porfirinas foram preparadas a partir de sua dissolução em diclorometano (DCM) para então realizar a determinação de seus espectros de absortividade molar, o qual foi obtido a partir da aplicação da lei de Beer-Lambert (2) e de emissão de fluorescência. Além disso, foram realizadas medidas de eficiência quântica de fluorescência, visando a determinação das taxas de decaimento radiativo e não radiativo. Por último, foram realizadas medidas dos tempos de vida de fluorescência, uma das propriedades mais importantes de uma molécula fluorescente, pois é o que define a janela temporal do fenômeno dinâmico ocorrido além de fornecer outras informações sobre reações intermoleculares. Obtendo os espectros de absorção na região do UV-Vis dessas moléculas, foi possível observar que a banda de Soret, de absorção máxima, se dá em aproximadamente 425 nm, e as bandas Qs se mostram entre 500 e 680 nm. Estas são fortemente afetadas pelos íons metálicos devido ao aumento da simetria molecular. A partir desse espectro, também foi possível se observar o aparecimento de duas bandas na região de 240 nm a 330 nm, as quais estão relacionadas aos quatro grupos fluoreno inseridos ao anel macrocíclico. Percebeu-se a partir do espectro de fluorescência das moléculas, que as porfirinas de base livre e cobre emitem com máxima intensidade em 660 nm, enquanto a porfirina de zinco emite em 612 nm. Com isso e com medidas similares da hematoporfirina, já bem caracterizada, pôde-se calcular os rendimentos quânticos de fluorescência de cada porfirina a partir do método de Brouwer (3), os quais se mostraram baixos, com a porfirina de base livre apresentando o maior valor entre eles, de 3.86%. Por fim, os tempos de vida de fluorescência foram medidos a partir da técnica de fluorescência resolvida no tempo com pulsos de femtossegundos. O resultado para a porfirina de zinco mostrou uma diminuição do tempo de vida de fluorescência com a inserção do íon metálico ao centro do anel porfirínico. Esse resultado está em acordo com a eficiência quântica de fluorescência, mostrando que o íon metálico tende a aumentar a relaxação não radiativa, propriedade que pode ser usada como aliado da terapia fototérmica.

Palavras-chave: Porfirina. Espectroscopia. Óptica linear.

Referências:

1 KOU, J.; DOU, D.; YANG, L. Porphyrin photosensitizers in photodynamic therapy and its applications. **Oncotarget**, v. 8, n. 46, p. 81591–81603, 2017. 2 HOLLAS, J. M. **Modern spectroscopy**. 4th ed. Chichester : J. Wiley, 2004. 3 BROUWER, A. M. Standards for photoluminescence quantum yield measurements in solution (IUPAC Technical Report). **Pure and Applied Chemistry**, v. 83, n. 12, p.

2213–2228, 2011.

125

IC74

Desenvolvimento de técnica de mosaico para produção de imagens de retinografia

MACHADO, S.; CASTRO NETO, J. C.[1]

samuelfmachado@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos Ampliar o campo de visão de imagens obtidas a partir de exame de retinografia, de forma a gerar, por meio de algoritmos de mosaico, uma imagem consistente e com alta qualidade. Pra isso, vamos desenvolver um método eficiente capaz de produzir imagens consistentes de retinografia utilizando técnicas de mosaico. Além disso, pretendemos implementar métodos de extração de features em imagens de retinografia(1). Após extrairmos essas features, iremos implementar a técnica de mosaico. E por fim, testamos e avaliamos os métodos implementados. Métodos e Procedimentos Será usado o retinógrafo coaxial-não midriático desenvolvido por De Oliveira(2). Neste projeto será utilizada a linguagem C++, que é uma linguagem de programação orientada a objeto. Essa linguagem é caracterizada pela sua velocidade em sistemas embarcados se comparada com outras linguagens orientadas a objeto. Além disso, utilizamos a biblioteca OpenCV. Após a primeira etapa, revisão bibliográfica, e a compreensão das técnicas associadas aos extratores de imagens, foram produzidas algumas amostras utilizando o Retinógrafo, com isso testamos o algoritmo para avaliar a eficiência das imagens montadas, com a eficiência do algoritmo. Resultados Ao final do projeto, desenvolvemos um algoritmo suficientemente eficiente para a montagem de mosaicos de retinografia. Com ele fomos capazes de identificar as principais estruturas do olho humano, como mácula, fóvea, e vasos; e identificar patologias características dessas estruturas com certa facilidade. Com isso conseguimos facilitar os exames de retinografia, que agora podem ser feitos a partir de uma visão mais geral das estruturas oculares, sem a necessidade de observar cada estrutura individualmente. Conclusões Este projeto tornou o exame de Retinografia mais fácil e agradável para o médico e para o paciente. Para o médico fica mais fácil observar as estruturas como um todo, e mais simples de ser feito com a imagem pronta. Para o paciente o exame fica mais rápido, já que o médico não precisa avaliar as estruturas enquanto fotografa, diminuindo o incômodo ao paciente. Além disso verificamos a eficiências das técnicas de extração de imagem e da montagem de mosaicos

Palavras-chave: Retinografia. Óptica. Mosaico. Imagem.

Referências:

1. BAY, H.; TUYLAARS, T.; GOOL,F. SURF: speed UP robust features. **Computer Vision and Image Understanding**, v.110, n.3, p.404-417,2006. 2. 2 OLIVEIRA, A O. **Retinógrafo coaxial não-midriático**. Tese (Doutorado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

126

IC75

Modelo de irradiação e avaliação de degradação para descontaminação de líquidos de preservação de órgãos para transplante por inativação fotodinâmica

SANTOS, S. M. B.; BAGNATO, V. S.; VOLLET FILHO, J. D.; KURACHI, C.
sofia.brandao@unesp.br

Este estudo refere-se à exploração da luz visível (através da inativação fotodinâmica) para descontaminar fluidos circulantes usados como soluções de preservação de órgãos através de um dispositivo envolvendo irradiação com luz no espectro visível da radiação eletromagnética, com a iluminação disposta perimetralmente à região iluminada. O dispositivo consiste de arranjo em circuito fechado através do qual circula o fluido a ser descontaminado de modo a ser iluminado continuamente por fonte de luz visível associada a fotossensibilizador adicionado ao referido fluido, de modo a obter ação fotodinâmica, com o objetivo de, em um ou outro caso, promover a redução microbiológica de fluidos. O sistema de iluminação é totalmente externo, não interrompendo o circuito de circulação e podendo ser removido sem compromisso para a circulação. Os testes serão realizados com a perfusão in vitro, com contaminação bacteriana e sem envolvimento de órgãos.

Palavras-chave: Fotodinâmica. Transplante. Descontaminação de órgãos

Referências:

1 SOUTHARD, J. H. ;FOLKERT,O.;BELZER, M.D. Organ preservation. **Annual Review Medicine**,v.46,p.235-47,1995. 2
2 LEMA. G.L.; ZULUAGA, R.E.;AGUDELO, S.;TOBON, Z. Preservation solutions for liver transplantation in aults: clsior versus Custodiol: A systematic review and meta analysis with an indirect comparison of randomized trials. **Transplantation Proceedings**, v.45,p. 25–32,2013.
3 MARCIEL, L. *et al*. An effective and potentially safe blood disinfection protocol using tetrapyrrolic photosensitizers. **Future Medicine Chemistry**,v.9, n.4,p.365-379,2017.

127

PG1
Rotating BEC in a ring trap

TOMISHIYO, G.[1]; SANTARELLI, M. C.[1]
tomishiyo@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Since its experimental realization, BECs in ultracold gases have been invaluable tools in exploring the physics of superfluidity, and in particular, the physics of rotating superfluids. Contrary to the classical expectation, a rotating superfluid does not develop a rigid body velocity field. Instead, the fluid is irrotational in any closed loop taken in the fluid, with exception of lines of vanishing density where circulation is quantized. These lines are called vortices, an entirely quantum phenomenon. If the rotation rate is increased, a vortex array forms in the bulk of the gas in a triangular, Abrikosov-like configuration. However, typically ultracold gases BECs are confined in harmonic oscillator type potentials, which sets a limit for the rotation rate: if the rotation frequency exceeds the trap frequency, the gas deconfines from the trap and it is no longer possible to experimentally probe it. (1) This fact prompted research for potentials that provides a stronger than harmonic confinement. One such a potential that was attracted much attention from the community is the bubble trap potential, where the gas is confined to the surface of an ellipsoid. (2) In a number of situations, this trap can be adequately described by a displaced harmonic oscillator type potential, or ring trap. (3) In our work, we investigate the physics of rotating, weakly interacting BECs in ring trap potentials by employing numerical methods and a variational wavefunction. We show that the variational wavefunction can describe with satisfaction the condensate when it contains a multiply charged vortex or a small vortex array. We investigate whether the condensate displays a multiply charged vortex, a vortex array or a hybrid scenario by varying the interaction strength and the rotation speed. Using our variational wavefunction, we make predictions of the expected frontier in the parameter space between vortices of different charges. Finally, by employing sum rules we calculated the frequency of monopole collective modes, comparing our prediction numerically and finding good agreement. In the future, we plan to extend our calculations to quadrupole modes, which can be used as a method for indirect detection of vortices. We also plan to calculate the continuous transition between a multiply q-charged vortex and q vortices of charge 1, therefore completing our picture of the phase diagram.

Palavras-chave: BEC. Atomic physics. Superfluids.

Referências:

1 PETHICK, C.; SMITH, H.**Bose-Einstein condensation in dilute gases**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
2 ZOBAY, O.; GARRAWAY, B.M. Two-dimensional atom trapping in field-induced adiabatic potentials. **Physical Review Letters**, v. 86, n.7, p. 1195-1198, February 2001. 3 PERRIN H.; GARRAWAY, B. M. Trapping atoms with radio-frequency adiabatic potentials. **Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics**, v. 66, p.181-262, June 2017. DOI: 10.1016/bs.aamop.2017.03.002.

128

PG2

Estudo da complexidade emergente de modelos topológico-dinâmicos

DOMINGUES, G. S.[1]; COSTA, L. F.[1]

guilherme.domingues@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Muitos modelos são usados pela ciência para descrever diferentes fenômenos da natureza. Esses modelos variam no número de detalhes que abrangem, resultando em níveis de complexidade diferentes e implicando em previsões mais ou menos precisas. Neste projeto propomos investigar a evolução da complexidade emergente de um sistema ao utilizarmos modelos topológicos e dinâmicos, considerando modelos de diferentes naturezas e de complexidades incrementais, (1) e também buscar responder perguntas sobre a relação entre a complexidade investida e a precisão resultante destes modelos, (2) bem como sobre a relação entre complexidade e a otimização da eficiência de redes através da redução de seu mínimo caminho médio por adição de arestas. (3) Os modelos topológicos e dinâmicos são apresentados, neste trabalho, juntamente com algumas ferramentas para o cálculo da complexidade e para a análise dos sinais que serão produzidos como saídas dos modelos estudados.

Palavras-chave: Ciência de Redes. Modelagem. Complexidade.

Referências:

1 COSTA, L. F.; DOMINGUES, G. S. **Quantifying complexity.** Disponivel em: arXiv:1905.11925,2019.Acesso em: 21 maio 2021.
2 KLUGER, J. **Simplexity**: why simple things become complex (and how complex things can be made simple). Paris: HachetteBooks, 2008.
3 DOMINGUES, G. S.; COMIN, C. H.; COSTA, L. F. **Shortest paths in complex networks:** structure and optimization. 2020. Disponivel em: arXiv::2003.12180v.Acesso em:21 maio 2021.

129

PG3

The deluge of spurious information in causal network inference

MARTINELLI, T.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]; RODRIGUES, F. A.[2]

tiago.martinelli@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

Large databases are a prime opportunity for science, and data analytics is a remarkable new field of investigation in computer science and physics. Within this paradigm, causal inference (1) is an effective tool to reveal the mechanisms producing emergent phenomena in a multivariate data-generated complex system. One of the main questions regarding these mechanisms is how their organization, represented by large networks, influences the dynamical processes. Such a study is fundamental to control processes from changes in the network structure avoiding, for example, cascading failures. In practice, however, the only information available is data recorded from variables with unknown topology. Using causal algorithms and information theory, we can explore this scenario by quantifying individuals' influence on the system, inferring links among them, thus reconstructing the underlying network. In other words, we can make reverse engineering to obtain a causal graphical model via data. Built upon the concept of causal faithfulness, the so-called *causal discovery algorithms* have been proposing the breakdown of the contributions of the mutual information (MI) and conditional mutual information (CMI) among sets of variables to reveal influences. (2) These algorithms suffer from the lack of accounting *emergent causes* when connecting links resulting in a spuriously embellished view of the organization of complex systems. Using classical results from Ramsey's theory, we proved that CMI's with large conditioned datasets contain, necessarily, arbitrary correlations. These correlations appear only because of the size, not nature, of data. They can be found in "randomly"generated, large enough databases. (3) We also connected this result with the intrinsic violation of faithfulness to reveal causal emergency. The net result is an update of the well-known causa discovery algorithms, which can, in principle, detect and isolate emergent causal influences in the reconstructed network undetected so far.

Palavras-chave: Causal inference. Information theory. Data analysis.

Referências:

1 PEARL, J. **Causality**: models, reasoning and inference. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
2 RUNGE, J. Causal network reconstruction from time series: from theoretical assumptions to practical estimation. **Chaos**, v. 28, n. 7, p. 075310-1-075310-20, 2018. DOI 10.1063/1.5025050.
3 CALUDE, C. S.; LONGO, G. The deluge of spurious correlations in big data. **Foundations of Science**, v. 22, n. 3, p. 595-612, 2017. DOI 10.1007/s10699-016-9489-4.

130

PG4

Non-asymptotic Coqblin-Schrieffer interaction between local f^1-states

PICOLI, F. D.[1]; LÍBERO, V. L.[1]

felipepicoli@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The magnetism of many cerium-based compounds has been studied considering the hybridization of its local f^1 state with itinerant electrons, a mechanism that originates an anisotropic RKKY-type interaction between two neighboring local moments. (1-3) The orbital degrees of freedom of the f-levels play a fundamental role in this mechanism, as showed in the well-known Coqblin-Schrieffer formalism (1-2), developed in the limit of ions very far apart. Through an exact evaluation of Ruderman-Kittel-like integrals, we extended such formalism to any ionic separation and also correct the non-hermiticity of the original effective two-ion Hamiltonian, introducing the ionic interchange symmetry. (3) These corrections impact directly in the relative contribution of each ionic angular momentum components to the interaction energy and consequently whether ferro- or anti-ferromagnetic alignment is favored. While the asymptotic Coqblin-Schrieffer formalism fails predicting only ferromagnetic or antiferromagnetic ordering for the non-diagonal interaction components as a function of k_FR, our exact calculation shows typical RKKY behavior due to Friedel oscillations.

Palavras-chave: Coqblin-Schrieffer formalism. RKKY interaction. Cerium-based compounds. Magnetism.

Referências:

1 COQBLIN, B.; SCHRIEFFER, J. R. Exchange interaction in alloys with cerium impurities. **Physical Review**, v. 185, n. 2, p. 847-853, Sept. 1969.
2 SIEMANN, R.; COOPER, B. R. Planar coupling mechanism explaining anomalous magnetic structures in cerium and actinide intermetallics. **Physical Review Letters**, v. 44, n. 15, p. 1015-1019, Apr. 1980.
3 WILLS, J. M.; COOPER, B. R. Synthesis of band and model Hamiltonian theory for hybridizing cerium systems. **Physical Review B**, v. 36, n. 7, p. 3809-3823, Sept. 1987.

PG5

Subradiance with saturated atoms: population enhancement of the long-lived states

MOREIRA, N. A.; CIPRIS, A.[1]; SANTO, T. S. E.; WEISS, P.[2]; VILLAS-BOAS, C. J.[3]; KAISER, R.[1]; GUERIN, W.[1]; BACHELARD, R.[3]

noel.araujo.moreira@gmail.com

[1]Université Côte d'Azur

[2]Eberhard Karls Universität Tübingen

[3]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Dipole-dipole interactions are at the origin of long-lived collective atomic states, often called subradiant, which are explored for their potential use in novel photonic devices or in quantum protocols. (1) Here, we study subradiance beyond linear optics and experimentally demonstrate a two hundred-fold increase in the population of these modes, as the saturation parameter of the driving field is increased. We attribute this enhancement to a mechanism similar to optical pumping through the well-coupled superradiant states. The lifetimes are unaffected by the pump strength, as the system is ultimately driven toward the single-excitation sector. For further details, check our publication. (2)

Palavras-chave: Collective states. Subradiance. Optical pumping.

Referências:

1 FACCHINETTI, G.; JENKINS, S. D.; RUOSTEKOSKI, J. Storing light with subradiant correlations in arrays of atoms. **Physcal Review Letters**. v. 117, n. 24, p. 243601-1-243601-5, Dec. 2016.
2 CIPRIS, A.; MOREIRA, N. A.; ESPIRITO SANTO, T. S.; WEISS, P.; VILLAS-BOAS, C. J.; KAISER, R.; GUERIN, W.; BACHELARD, R. Subradiance with saturated atoms: population enhancement of the long-lived states. **Physcal Review Letters**. v. 126, n. 10, p 103604-1-103604-6, Mar. 2021.

132

PG6

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

BORALLI, C. M. S.[1]; CAMARGO, I. L. B. C.[1]; SILVA, G. V.[2]; HUANAMBAL, P.[1]; RIOS, A. L. V.[3]

camila.boralli@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]UNIP

[3]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

A resistência aos antibióticos é uma grande ameaça em todo o mundo. Infecções estão cada vez mais difíceis de serem tratadas, à medida que os antibióticos se tornam menos eficazes. Atualmente, os β-lactâmicos são a classe de agentes antibacterianos mais utilizada e agem interrompendo a formação da parede celular bacteriana. Dentre as β-lactamases, as carbapenemases são enzimas com o maior espectro/potencial de degradação dos β-lactâmicos e recebem esse nome por conferirem resistência aos carbapenêmicos. Gene *bla*KPC (beta-lactamase *Klebsiella pneumoniae* carbapenemase) codifica uma serina-carbapenemase que vem sendo descrita em várias Enterobacterales. (1) Esse gene foi descrito, primeiramente, no transposon Tn4401, ambiente genético ao qual se atribui a mobilidade do gene. Porém, cada vez mais são relatados casos deste gene em outros ambientes genéticos, denominados *non-Tn4401 element containing bla*KPC (NTEKPC). (2-3) Essa variedade de ambientes genéticos pode ser encontrada em diferentes plasmídeos e o impacto desta mudança de ambiente genético e de plasmídeo na disseminação deste gene de resistência segue sem maiores elucidações. Assim, nosso objetivo é analisar bactérias gram-negativas que contenham gene *bla*KPC isoladas de infecções de pacientes hospitalizados para caracterizar novos NTEKPC, bem como a diversidade de plasmídeos que os abrigam. Posteriormente, avaliaremos o impacto destes plasmídeos em diferentes espécies bacterianas. As bactérias deste estudo pertencem a diversas espécies e são provenientes de 4 hospitais do Brasil. Até o momento, 68 das 215 (32%) amostras bacterianas resistentes aos carbapenêmicos estudadas apresentaram o gene *bla*KPC. Em seguida, investigamos o ambiente genético que carreia o gene *bla*KPC por reações de PCR com primers específicos para Tn4401 e para um NTEKPC identificado anteriormente pelo nosso grupo em um isolado clínico de Manaus. A presença do Tn4401 foi identificada em 15% das amostras blaKPC positivas (10/68), porém o NTEKPC descrito em Manaus não foi encontrado em nenhuma amostra. Vale ressaltar que em cada hospital observamos frequências diferentes para presença do gene no Tn4401. Em seguida, tipamos as amostras *bla*KPC positivas de cada espécie contendo NTEKPC pela macrorrestrição do DNA genômico seguida de Eletroforese em Gel por Campo Pulsado (PFGE) para identificação de populações clonais e análises de similaridade genética. Dentre as populações clonais detectadas, selecionamos 58 isolados bacterianos representantes e iniciamos ensaios de conjugação em *E. coli* J53 e dois isolados clínicos de *K. pneumoniae*: AMKP36 e AMKP32. Até o momento, foi possível obter transconjugantes de 5 amostras clínicas. O próximo passo será sequenciar o genoma de todos os isolados pela tecnologia *Nanopore*, para conhecer os ambientes genéticos e plasmídeos que abrigam o gene *bla*KPC. A partir das análises desses genomas, selecionaremos uma variedade de bactérias para caracterizar seus plasmídeos quanto a estabilidade, taxas de conjugação, replicação e transcrição, bem como verificar o impacto da presença do plasmídeo no metabolismo de bactérias de diferentes espécies para compreender a dinâmica da disseminação da resistência bacteriana aos carbapenêmicos.

Palavras-chave: BlaKPC. Carbapenemase. Tn4401. NTEKPC.

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 NASS, T. *et al.*. Genetic structures at origin of acquisition of the β-Lactamase blaKPC gene. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 52, n. 4, p. 1257-1263, 2008.
3 CHEN, L. *et al.* Carbapenemase-producing *Klebsiella pneumoniae*: molecular and genetic decoding. **Trends in Microbiology**, v. 22, n. 12, p. 686-696, 2014.

134

PG7
Chiral spin liquids in the Kagome lattice

SOBRAL, J. A. S.[1]; OLIVIERO, F. G.[2]; PEREIRA, R. G.[2]; ANDRADE, E. C.[1]

joaoaugustosds@gmail.com

[1]University of Sao Paulo

[2]Federal University of Rio Grande do Norte

Spin liquids are exquisite states of matter which host fractionalized excitations of spin and show no long-range magnetic order even at zero temperature due to quantum fluctuations. They've been extensively studied using fractionalized representations of the spin degrees of freedom in the so-called parton construction – such as the Abrikosov fermions, Schwinger bosons or Majorana fermions – in conjunction with the Gutzwiller projection which imposes the no double occupancy constraint at each site to correctly describe the physical Hilbert space. (1) Using Mean Field Theories (MFT), this constraint is imposed on average sense, and numerical techniques, such as the Variational Monte Carlo (VMC), are required to impose this condition exactly at each site. In this framework, the VMC is a powerful tool to indicate which MFT ansatz is favored energetically to represent the spin liquid state based on the variational principle and the specific spin fractionalized representation. We employed this approach to investigate a putative chiral spin liquid state in the Kagome lattice using the Abrikosov representation to decompose the spin into spinons: neutral spin-1/2 fermionic quasiparticles. This work was done having the Jd-Jx Kagome Lattice model in mind, a minimal model inspired by the material Kapellasite (2), a polymorphous structure of Herbertsmithite, with Heisenberg interactions in the diagonals of the hexagons and staggered chiral interactions in the triangles of the Kagome Lattice. Our VMC results favor a gapless chiral spin liquid with staggered half pi flux over the triangles and zero flux on the hexagons in the region with $|Jd/Jx|>0$. (3) We also investigated the stability of this spin-liquid state with respect to ordered phases known to occur in the model.

Palavras-chave: Chiral spin liquids. Parton construction. Variational Monte Carlo.

Referências:

1 SAVARY, L.; BALENTS, L. Quantum spin liquids: a review. **Reports on Progress in Physics**, v. 80, n. 1, p. 016502-1-016502-55, Jan. 2017.
2 FÅK, B *et al.* Kapellasite: A kagome quantum spin liquid with competing interactions. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 3, p. 037208-1-037208-5, July 2012.
3 BIERI, S.; LHUILLIER, C.; MESSIO, L. Projective symmetry group classification of chiral spin liquids. **Physical Review B**, v. 93, n. 9, p. 094437-1-094437-28 , Mar. 2016.

PG8
Identificação de minérios de ferro

QUEIROZ, A. E.[1]; ANDRADE, M. B.[1]
alfredo.queiroz@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O minério de ferro brasileiro tem atendido uma demanda crescente nos últimos anos por siderúrgicas internacionais, principalmente as localizadas na China e nos Estados Unidos. A empresa Vale estima que a produção no ano de 2021, fique entre 315 e 335 milhões de toneladas de minério de ferro, ultrapassando 2020 em mais de 10 milhões de toneladas. A expectativa para 2022 é ainda maior, uma produção de aproximadamente 400 milhões de toneladas. (1) O preço da tonelada do minério tem atingindo valores superiores a 200 dólares, gerando uma receita da ordem de dezenas de bilhões de dólares. Esta demanda incentiva a identificação de novos depósitos de minérios de ferro e com isso, o desenvolvimento de técnicas de rápida caracterização e identificação de espécies minerais, levando em conta a variação de composição e polimorfismo estrutural, como no caso da hematita, magnetita, goethita e outros. (2) A hematita (Fe_2O_3) e a maghemita ((Fe^{3+}_0_._6_7[U+25FB]_0_._3_3)Fe^{3+}_2O_4) possuem composição química semelhante, mas possuem estruturas cristalinas distintas. Já a magnetita (Fe^{2+}Fe^{3+}_2O_4) tem a mesma estrutura cristalina da maghemita. Os óxidos de ferro apresentam modos vibracionais ativos Raman que são sensíveis a alterações estruturais e químicas destes minérios. (3) Neste trabalho, utilizamos os espectros Raman, em conjunto com difração de raios X para a completa caracterização e identificação de espécies minerais ricas em ferro, com algoritmos classificadores de aprendizagem de máquina. Focamos em classificadores de redes neurais artificiais baseados nas frequências observadas nos espectros Raman. A espectroscopia Raman associada com o aprendizado de máquina poderá ser de grande auxílio e valor para os processos de exploração e beneficiamento da indústria mineradora.

Palavras-chave: Minério de ferro. Espectroscopia Raman. Aprendizado de máquina.

Referências:

1 BRASILMINIGSITE. **Heavy rains put pressure on Brazilian iron ore shipments**. 01 abr. 2021. Disponível em: https://brasilminingsite.com.br/heavy-rains-put-pressure-on-brazilian-iron-ore-shipments. Acesso em: 31 maio 2021.
2 TUčEK, J. *et al*. Zeta-Fe2O3: a new stable polymorph in iron(III) oxide family. **Scientific Reports**, v. 5, p. 15091-1-15091-11, Oct. 2015. DOI 10.1038/srep15091.
3 FARIA, D. L. de, VENÂNCIO SILVA, S.; OLIVEIRA, M. T. de Raman microspectroscopy of some iron oxides and oxyhydroxides. **Journal of Raman Spectroscopy**, v. 28, n. 11, p. 873-878, Nov. 1997. DOI 10.1002/(SICI)1097-4555(199711)28:11<873::AID-JRS177>3.0.CO;2-B.

PG9

Descrição e caracterização cristaloquímica de minerais brasileiros, com ênfase em minerais do Estado do Amapá-AP

LOPES, G. A. C.[1]; ANDRADE, M. B.[1]; ATENCIO, D.[2]

g.anderson@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Geociências - USP

O Brasil possui uma das maiores reservas minerais do planeta e é um dos maiores exportadores de minério da atualidade. Entretanto, a quantidade de informação acerca das espécies minerais brasileiras é escassa. Somente 74 espécies minerais novas já foram catalogadas no Brasil (1), número esse muito aquém do esperado considerando a extensão territorial do Brasil, seu histórico de exploração mineral e o comparativo com os dados mineralógicos de outros países. Essa discrepância se deve, principalmente, ao fato de a caracterização de espécies minerais no Brasil não ter recebido a devida ênfase no passado. Visando preencher essa lacuna de conhecimento, foi criado o Centro de Caracterização de Espécies Minerais (CCEM), atualmente sediado no Instituto de Física de São Carlos. Desde sua inauguração, os pesquisadores associados ao CCEM já caracterizaram 09 novos minerais, sendo 08 novos minerais brasileiros, além de ter participado em diversas outras pesquisas. O mais recente destes minerais descritos foi a parisita-La, em 2018. (2) Este projeto visa contribuir com a caracterização de minerais brasileiros, em particular os minerais obtidos no Estado do Amapá, pois este é um dos estados brasileiros que possuem a mineração como uma de suas principais atividades econômicas há mais de 70 anos. Porém o volume de dados sobre os minerais amapaenses é bastante reduzido. Somente 37 ocorrências minerais no Amapá já foram reportadas na literatura, mas nenhuma amostra-tipo. Uma das poucas amostras de minerais amapaenses que já foram analisadas por espectrometria Raman, por exemplo, é a pirolusita, de composição MnO2, no qual identificou-se a presença deste mineral, diferenciando-o do seu polimorfo ramsdellita. (3) Para a execução deste projeto serão utilizadas tanto amostras já coletadas em diversas ocorrências como outras a obter por intercâmbio com museus e instituições de pesquisa, bem como amostras obtidas durante novos trabalhos de campo em localidades brasileiras, especialmente amapaenses. Entre os centros de pesquisa parceiros que atuarão como fornecedores de amostras estão: a) o Núcleo de Pesquisa Arqueológica (NUPArq), pertencente ao Instituto de Pesquisas Científicas e Tecnológicas do Estado do Amapá (IEPA); e b) o Laboratório de Geomorfologia e Solos (LAGESOL), pertencente à Universidade Federal do Amapá (UNIFAP). Os principais objetivos deste trabalho consistem em obter espectros característicos através de espectroscopia Raman, dados cristalográficos por difração de raios X e de composição química por microssonda eletrônica, classificando as espécies presentes de acordo com as regras da Associação Mineralógica Internacional (IMA). A possibilidade de constatação da existência de novas espécies minerais durante esse projeto é elevada, daí sua importância, que vai além do âmbito somente da mineralogia, abrangendo por exemplo a química, visto que muitas vezes os novos minerais também são novos compostos inorgânicos, e a economia, pois os minerais são fontes de elementos químicos de interesse tecnológico.

Palavras-chave: Minerais do Amapá. Difração de raios-X. Espectroscopia Raman.

Referências:

1 ATENCIO, D. **Type mineralogy of Brazil**: a book in progress. Sao Paulo: IGc, 2020.
2 MENEZES FILHO, L. A. D. *et al*. Parisite-(La), ideally CaLa2(CO3)3F2, a new mineral from Novo Horizonte, Bahia, Brazil. **Mineralogical Magazine**, v. 82, n. 1, p. 133-144, 2018.
3 POST, J. E.; MCKEOWN, D. A.; HEANEY, P. J. Raman spectroscopy study of manganese oxides: Tunnel structures. **American Mineralogist**, v. 105, n. 8, p. 1175-1190, 2020.

138

PG10

Imidazopyridines derivatives: an evidence of excited state absorption contributing to the two-photon absorption

PELOSI, A.[1]; BONI, L.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]; COCCA, L. Z.[1]; ABEGAO, L.[2]; SCIUTI, L.[1]; PIGUEL, S.[3]

andre.gasparotto.pelosi@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Fisica de Goias - UFG

[3]Université Paris-Saclay

Imidazo[4,5-b]pyridines is receiving quite attention due to the fact of they are isosteres of purine molecules, allowing a large range of biology applications . The advance of molecular engineering in the last years makes possible the easy production at low-cost of the molecular structure of interest with different peripherical groups added to its core, allowing to model its nonlinear optical response. This work presents a study about spectroscopic properties of six imidazo[4,5-b]pyridines derivatives with different electron-acceptor groups added to its backbone. Linear spectroscopy parameters such as molar absorptivity, fluorescence quantum yield, fluorescence lifetime, anisotropy coefficient, transition dipole moments and permanent dipole moment were determined thorugh linear spectroscopy techniques. The two-photon absorption cross section sepctrum was determined through the tunable femtosecond Z-Scan technique (1) and it was modeled by the phenomenological Sum-Over-States. The SOS approach depicted good agreement with the experimental results and show a strong dependence with the three-states term, i.e., the term which describes the absorption from the first electronic state to the second one. After, transient absorption measurements were employed to verify the excited state absorption and determine the fluorescence lifetime of the six imidazopyridines derivatives. The excited state absorption was verifyed in which could be the same electronic state of the two photon absorption one, indicating that such state is important to two photon absorption processes. In addition, molecules with two acception-electron groups added to the core of imidazopyridines presented higher two-photon absorption cross section, indicating a good route to increase the nonlinear absorption of such molecular structure.

Palavras-chave: Imidazopyridine derivatives. Two-photon absorption. Transient absorption.

Referências:

1 SHEIK-BAHAE,M. *et al*. Sensititive measurement of optical nonlinearities using a single bem.**IEEE Journal of Quantum Electronics**v. 26,n.4,p. 760–769,1990.

PG11

Transparência eletromagneticamente induzida em átomos de Rydberg com quatro níveis usando modos Laguerre-Gauss

GOMES, N. D.[1]; MARCASSA, L. G.[1]

naomy.gomes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Átomos de Rydberg são conhecidos por suas propriedades especiais devido ao alto número quântico principal *n* e longos tempo de vida. (1) Estas propriedades, tais como alta polarizabilidade e fortes transições de dipolo, fazem com que eles sejam ótimos instrumentos de medidas de campos elétricos. Neste trabalho, queremos utilizar a transparência eletromagneticamente induzida (2) para mapear a interação dos átomos Rydberg com campos microondas em uma resposta óptica. Consideramos um sistema com quatro níveis de energia, utilizando um feixe de prova Gaussiano e um feixe de acoplamento no modo Laguerre-Gauss (LG). (3) O feixe de prova conecta os estados 5S_1/2 e 5P_3/2 do Rubídio. Já o feixe de acoplamento conecta o estado 5P_3/2 a um estado de Rydberg do tipo *nD*, que por sua vez é conectado a outro estado de Rydberg por um campo elétrico de micro-ondas. Neste sistema de quatro níveis, observamos um aumento na curva de transmissão do feixe de prova devido ao campo de microondas e até mesmo o fenômeno de separamento Autler-Tones (surgimento de dois picos de transmissão) para valores de campos muito altos, sendo a separação dos picos proporcional à amplitude do campo. A utilização de modos LG no feixe de acoplamento, quando comparada com o modo Gaussiano, causa um afinamento na largura da curva de transmissão. Neste estudo, queremos analisar quais as vantagens e desvantagens do modo LG para medição de campos microondas com alta precisão.

Palavras-chave: Transparência eletromagneticamente induzida. Átomos de Rydberg. Laguerre-Gauss.

Referências:

1 GALLAGHER, T. F. **Rydberg atoms**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. (Cambridge monographs on atomic, molecular, and chemical physics, 3).
2 FLEISCHHAUER, M.; IMAMOGLU, A.; MARANGOS, J. P. Electromagnetically induced transparency: optics in coherent media. **Reviews of Modern Physics**, v. 77, n. 2, p. 633-673, 2005.
3 ALLEN, L. *et al*. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes. **Physical Review A**, v. 45, n. 11, p. 8185-8189, 1992.

140

PG12

Construção de sistema de translação óptica de átomos frios com uso de sistema de lentes de zoom opticamente compensadas.

MARTINEZ, V. J.[1]; AGOSTINHO, E. T.[1]

vinicius.martinez@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os sistemas para estudos de átomos frios se tornaram muito complexos e mutáveis nos últimos anos, permitindo uma diversidade de temas à serem estudados e uso de inúmeras ferramentas para tal.(1)Um experimento que permite a produção de um condensado de Bose-Einstein utiliza vários feixes de luz em quase todas as direções do espaço, muitas vezes em intensidades que podem diferir por várias ordens de magnitude. Ademais, várias bobinas são usadas para controle fino dos campos magnéticos envolvidos e aplicação de radio-frequência a fim de induzir transições entre estados hiperfinos. Este mecanismo é colocado em torno de uma câmara de vácuo com pressões da ordem de 10^{-12} Torr.Assim sendo, o manuseio fino de tais amostras quânticas normalmente fica limitada pela ausência de acesso óptico e pela configuração do sistema. Uma das soluções encontrada na maioria dos sistemas experimentais atuais é dividir fisicamente os processos: aprisionamento e resfriamento ocorrem em uma câmara de vácuo e, posteriormente à obtenção da amostra quântica, os átomos são transferidos fisicamente para uma câmara ao redor, onde não há qualquer tipo de aparato que impossibilite o acesso óptico e manipulação da amostra. Existe uma infinidade de técnicas para transportar átomos, desde armadilhas magnéticas com bobinas móveis (2) até armadilhas ópticas com posição do foco móvel. Pela simplicidade de implementação, a movimentação do ponto focal de um laser de alta potência na região do infravermelho, que caracteriza uma armadilha óptica, com átomos aprisionado no ponto focal é mais usada. Esta técnica de forma simples é composta por uma lente que focaliza o feixe de luz da armadilha e se move pela distância que se deseja mover o ponto focal, ou seja, a distância de transporte dos átomos. Quase sempre as distâncias são da ordem de dezenas de centímetros até pouco mais de um metro e, de fato, existem transladadores lineares comerciais que fazem esta movimentação de forma precisa, reprodutível e programável.Todavia, é consenso que quanto maior a distância a ser movimentada, maiores são os requisitos de estabilidade, precisão e maior a necessidade de espaço físico, pois os transladadores precisam pelo menos da mesma distância para atuar. Portanto, estratégias que permitam reduzir o uso do espaço e a distância de translação do sistema óptico são desejáveis.Em um trabalho recente, Lee e colaboradores(3) demonstraram o uso de um sistema de transporte óptico a partir de um *optically Compensated Zoom Lens* (OCZ). Neste trabalho eles demonstram a partir de simulações e caracterizam experimentalmente que é possível deslocar o ponto focal do sistema óptico de cerca de 1.5 m movimentando o conjunto de lentes por apenas 7 cm, simplificando os processos de movimentação. Portanto o objetivo deste trabalho é implementar e caracterizar totalmente um sistema de translação de átomos de Disprósio em uma armadilha óptica usando para isso um sistema de OCZ especificamente desenhado para o nosso laboratório. Este mestrado teve início em março de 2021, no momento estamos fazendo revisão de literatura e planejamento experimental que serão mostrados na apresentação.

Palavras-chave: Lente de zoom opticamente compensada. Transportes de átomos. Disprósio.

Referências:

1 BLOCH, I.; DALIBARD, J.; ZWERGER, W.. Many-body physics with ultracold gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 80, n. 3, p. 885, July 2008. 2 HÄNDEL, S. *et al*. Magnetic transport apparatus for the production of ultracold atomic gases in the vicinity of a dielectric surface,**Review of Scientific Instruments**, v. 83, n. 1, p. 013105, January 2012. 3 LEE, J. H. *et al*. Transporting cold atoms using an optically compensated zoom lens. **Physical Review A**, v. 102, n. 6, p. 063106, December 2020.

142

PG13

Imidazo[4,5-b]- pyridines derivatives as high emissive dyes for nucleic acids spectroscopic studies

COCCA, L. Z.[1]; PELOSI, A.[1]; SCIUTI, L.[1]; PIGUEL, S.; BONI, L.[1]

leandro.cocca@yahoo.com.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

In last decades organic materials have been used for several applications in photophysics, for example, we can mention, in solar cells, photosensitizers in photodynamic therapy (PDT) and fluorescent bioprobes. Nowadays, researchers have employed fluorescent purines base analogs derivatives as bioprobes for DNA or RNA fluorescent spectroscopic studies. Aiming these applications, searches for new materials which have considerable fluorescent characteristics are primordial. In this way, here, is presented a linear and nonlinear optical characterization of a class of 7 Imidazo[4,5-b]- pyridines (1)derivatives which have ability to be employed as fluorescent bioprobes for DNA and RNA researchs due to show isosterism with the natural base of nucleic acids. We determined the spectra of one photon absorption (1PA), the fluorescent life times and the fluorescence quantum yields through linear optical spectroscopy. Besides, we determined the two-photon absorption (2PA) cross section using Z-Scan technique.(2) The results shown that these materials have a peak of 2PA cross section around 700 nm and they present fluorescence quantum yields around 100%. Therefore, in view of these optical properties, these materials have good ability to be used as bioprobes in spectroscopic studies on DNA and RNA molecule.

Palavras-chave: Fluorescent bioprobes. Nonlinear optics.

Referências:

1 AZIZ, J.; BALADI, T.;PIGUEL, S. Direct alkynylation of 3H-imidazo[4,5-b]pyridines using gem-dibromoalkenes as alkynes source. **Journal of Organic Chemistry**, v.81, n.10, 4122–4133,2016.
2 SHEIK-BAHAE, M.; SAID, A. A.; VAN STRYLAND, E. W. High-sensitivity, single-beam N2 measurements. **Optics Letters,** v.14, n.17,p.955−957,1989.

PG14

Phenomenological modeling of the first hyperpolarizability of organic molecules applied in chalcone molecules

SCIUTI, L.[1]; BONI, L.[1]; COCCA, L. Z.[1]; ABEGAO, L.[2]; PELOSI, A.[1]; COSTA, R.[3]; MISOGUTI, L.[1]; LIMBERGER, J.[4]; MENDONÇA, C. R.[1]

lfsciuti@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Física - UFG

[3]Pontifica Universidade Catolica do Rio de Janeiro - PUC- RJ

[4]Pontifica Universidade Catolica do Rio de Janeiro - PUC-RJ

Chalcone-derived molecules can be found in a large variety in Nature, especially in the vegetal plant kingdom. Chalcones can be also synthetized in order to obtain a molecule with some specific application. Chalcone reviews states that more than 92000 articles have been published in this subject.(1) For example, these molecules are used in electro-optic modulators and have also been shown in second harmonic generation of laser light.(2) Both examples are related to an intrinsic molecular photophysical parameter: the first-order molecular hyperpolarizability (β), which is associated to the scattering of the second harmonic of an incident light at a certain frequency. Until nowadays, the task of experimentally obtain the frequency dispersion of the first-order hyperpolarizability is time consuming and laborious and the experimental setup is not trivial, with the use of a sub-nanoseconds pulsed laser source and the second-harmonic signal acquisitioned by a photomultiplier. Therefore, in this work, we applied a well-known phenomenological modeling (3) of the first hyperpolarizability in five chalcone-based molecules dissolved in dichloromethane (DCM) which present three experimental linear absorption bands, implying a modeling of the frequency dispersion without any simplifications as usually done in works where the first hyperpolarizability is obtained only with incident light of 1064 nm wavelength. The modeling consists in the determination of $\beta()$ through others photophysical parameters such as the transitions dipole moments, the central frequency and excited states width and the difference between permanent dipole moments of the molecular excited states, which were measured through one- and two-photon absorption spectra determination and fitting. Quantum chemical calculations (QCC), a widely used approach for such problem was used to analyze the correspondence of both methods. With QCC, the static first hyperpolarizability and its dispersion from 900 to 1200 nm was calculated. Finally, the values of the first hyperpolarizability in 1064 nm was also acquired with the hyper-Rayleigh scattering (HRS) experimental technique in order to confirm once more the validity of the phenomenological modeling in describe the dispersion of β.

Palavras-chave: First-order hyperpolarizability. Chacone molecule. Hypv.er-Rayleigh scattering.

Referências:

1 GOMES, M. N. *et.al.* Chalcone derivatives: promising starting points for drug design, **Molecules**. v.22, n.8, p.1210,2017. DOI: 10.3390/molecules22081210. 2 SHKIR, M. *et. al.* An investigation on the key features of a D--A type novel chalcone derivative for opto-electronic applications, **RSC Advances**,v.5 , n.33,p.87320–87332,2015..DOI: 10.1039/c5ra13494c. 3 ORR, B. J.; WARD, J.F., Perturbation theory of

the non-linear optical polarization of an isolated system, **Molecular Physics**, v.20, n.3, p.513–526,1971. Disponivel em: https://doi.org/10.1080/00268977100100481.

PG15

Construção de base de dados de compostos químicos para o desenvolvimento de modelos baseados em aprendizado de máquina aplicados à descoberta de candidatos a fármacos para a malária

NOGUEIRA, V. H. R.[1]; GUIDO, R. V. C.[1]; FASSIO, A.[1]

victor.nogueira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A malária é uma doença tropical infecciosa que possui a maior taxa de mortalidade ao redor do mundo. De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS), estima-se que, no ano de 2019, cerca de 229 milhões de casos da doença tenham ocorrido em todo o planeta, com cerca de 409 mil mortes em decorrência da infecção, das quais 67% representam mortes de crianças com menos de cinco anos de idade.(1) Atualmente, a África subsaariana é a região mais afetada pela doença, representando 94% de todos os casos estimados para o ano de 2019.(1).No Brasil, a área endêmica compreende a região Amazônica, principalmente devido às condições sociais, demográficas e ambientais. A malária é causada vários protozoários do gênero *Plasmodium*, sendo o *Plasmodium falciparum* o principal causador das mortes por essa doença. Esse parasito possui um ciclo de vida complexo, sendo transmitido para hospedeiros humanos por meio de mosquitos fêmeas do gênero *Anopheles* infectados. O tratamento para formas mais severas da doença é realizado com a terapia combinada de derivados da artemisinina (ACT).(2) Entretanto, há um aumento da resistência do parasito aos múltiplos medicamentos disponíveis para o tratamento, de modo que fica evidente uma grande necessidade de se desenvolver novos fármacos antimaláricos. Assim, investigar novos compostos como uma alternativa é uma estratégia bastante atrativa para a descoberta de novos agentes terapêuticos para o tratamento da malária.(2) Neste trabalho, descrevemos a construção de um banco de dados de estruturas químicas e atividade inibitória do *P. falciparum*. A base de dados contém moléculas testadas contra diferentes cepas do parasito causador da malária, extraídas do mais renomado periódico em química medicinal, o *Journal of Medicinal Chemistry*, publicados desde a década de 1970 até 2021. Para cada molécula, o banco possui informações como propriedades físico-químicas, potência antiplasmodial, cepa na qual foi testada e, quando disponível, o alvo molecular no qual a molécula foi testada. Atualmente, o banco possui mais de 2.000 moléculas que foram manualmente curadas. Essa base de dados será útil para a construção e treinamento de modelos generativos através de métodos de aprendizado de máquina, os quais têm sido cada vez mais utilizados para a descoberta de novos fármacos.(3) Esses modelos serão utilizados para a descoberta e planejamento de novas moléculas como candidatas a compostos líderes para a malária.

Palavras-chave: Malária. Banco de dados. Aprendizado de máquina.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World malaria report 2020**: 20 years of global progress and challenges. Geneva: 2020. 247 p. 2 AGUIAR, A. C. C. *et al*. New molecular targets and strategies for antimalarial discovery. **Current Medicinal Chemistry**. v. 26, n. 23, p. 4380-4402, 2019. 3 IMRIE, F. *et al*. Deep generative models for 3D linker design. **Journal of Chemical Information and Modeling**. v. 60, n. 4, p. 1983-1995, 2020.

PG16

Otimização da terapia fotodinâmica para tratamento do melanoma cutâneo, analisando tipos de fotossensibilizadores e associação com agentes clareadores ópticos

MARTINELLI, L. P.[1]; KURACHI, C.[1]; MORIYAMA, L. T.[1]; DIAS, L. D.[1]

leticia.martinelli@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O melanoma é o tipo mais agressivo de câncer de pele e um relevante problema de saúde devido à sua crescente incidência e pouca resposta às opções de tratamento atualmente disponíveis. Apesar de sua baixa incidência, apresenta altas taxas de mortalidade.(1) O tratamento padrão para o melanoma cutâneo ainda é a ressecção cirúrgica, muito invasiva e agressiva para o paciente, mas a radioterapia, a quimioterapia e a imunoterapia também estão sendo investigadas. Há necessidade, portanto, de desenvolver novas opções terapêuticas. A terapia fotodinâmica (TFD) é uma técnica baseada no uso de um composto denominado fotossensibilizador (FS), da luz em comprimento de onda adequado para a excitação do FS e do oxigênio presente no tecido tumoral. A reação fotodinâmica para indução da morte celular ocorre principalmente pela produção do oxigênio singleto, uma espécie altamente reativa e oxidativa.(2) No caso do melanoma cutâneo, em decorrência da alta concentração de melanina ser um dos principais absorvedores biológicos, a TFD apresenta uma pobre resposta pela grande limitação da penetração da luz no tumor. Os agentes clareadores ópticos ("Optical Clearing Agents", OCAs) vêm sendo utilizados para minimizar a atenuação da luz nos tecidos (3), especialmente em amostras biológicas para microscopia confocal. Nossa estratégia, portanto, é encontrar um protocolo eficaz para o tratamento do melanoma cutâneo em modelo animal, utilizando a TFD associada ao clareamento óptico. Para isso serão avaliados o efeito da combinação de novos fotossensibilizadores, sendo eles nanoemulsão de indocianina verde (fornecida pelo professor Gang Zheng da Universidade University Health Network), duas ftalocianinas, sintetizadas por um aluno de pós-graduação do grupo de Óptica-IFSC e nanotubos de carbono. Além disso, o modo de aplicação dos OCAs será por um dermógrafo com agulhas. As técnicas de análise serão himunoistoquímica e histológica, bem como Tomografia de Coerência Óptica (OCT). Na primeira, serão avaliadas células viáveis após 3 e 7 dias da TFD, para os grupos com e sem os OCAs, e o OCT será utilizado durante todas as etapas experimentais, na análise do tamanho do tumor, vascularização, dano tecidual, entre outros.

Palavras-chave: Melanoma . Agentes clareadores ópticos . Fotossensibilizadores.

Referências:

1 PINHEIRO, A. M. C.*et, al.*. Melanoma cutâneo: características clínicas, epidemiológicas e histopatológicas no Hospital Universitário de Brasília entre janeiro de 1994 e abril de 1999. **Anais Brasileiro de Dermatologia,** v.78, n.2,p.179–186,2003. 2 DOUGHERTY, T. J. *et al.* Photodynamic therapy, **Journal National Cancer Institute**, v.90, n.12, p. 889–905,1998. 3 MILLON,S.R..*et.al.* Effect of optical clearing agents on the in vivo optical properties of squamous epithelial tissue. **Lasers Surgery Medicine.** v.38,n.10. p.920–927,2006.

PG17
Studies of stochastic thermodynamics with optical weezers

KAMIZAKI, L. P.[1]; MARTINS, T. T.[1]; MUNIZ, S. R.[1]
lucas.kamizaki@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Thermodynamics is a phenomenological theory that deals with systems that have many degrees of freedom. Hence, the focus is on the averages of the physical quantities, for example, work and heat. However, fluctuations play an important role in describing the physics of small systems.In the present work, we have studied different aspects of these fluctuations: 1) We verified the Jarzysnki's equality and the Crooks' equality. 2) Tested the optimal protocols derived from different regimes of durations and strengths of protocols. 3) Analyzed how these fluctuations may be used, together with the information about the state of the system to convert information-to-energy.We have investigated these aspects using simulations of a colloidal particle in water trapped by an optical tweezer. The future goal is to verify this experimentally with the optical tweezer available. (1)

Palavras-chave: Termodinâmica estocástica . Pinças ópticas. Teoria da Informação

Referências:

1 MARTINS, T.T. **Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos.** 2019.167p..Dissertacao de Mestrado - (Mestre em Ciencias), Instituto de Fisica de Sao Carlos, Universidade de São Paulo, Sao Carlos, 2019.

148

PG18

Determinação da composição, estrutura e morfologia de Indicadores Biológicos Fixos e sua correlação com variações ambientais

FERREIRA, P. R.[1]; ALMEIDA, J. M. P.[2]; TAVARES, M. D. S.[3]; HERNANDES, A. C.[1]

paulina.ferreira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[3]Museu de Zoologia - USP

Este trabalho compreende o uso de corais escleractíneos como Indicadores Biológicos Fixos (IBFs), organismos aderidos a substratos marítimos rochosos, sujeitos a variações de temperatura e pressão dada a profundidade em que se encontram no fundo dos oceanos. IBFs são ferramentas importantes no mapeamento do nível relativo do mar e também podem ser usados como indicadores de temperatura, permitindo a reconstrução climática de regiões de interesse. (1) O esqueleto de corais escleractíneos é composto de carbonato de cálcio (CaCO3) majoritariamente aragonita, um polimorfo metaestável, cuja deposição é intermediada por processos biológicos ainda não profundamente compreendidos. (2) Corais escleractíneos são organismos especialmente interessantes como IBFs pois respondem a variações ambientais, a exemplo de temperatura e turbidez da água, alterando as taxas de deposição e a densidade do carbonato de cálcio, e apresentam ainda substituições de urânio ou estrôncio no sítios de cálcio da estrutura cristalina que facilitam o uso de técnicas datação radiativa, permitindo correlacionar as condições ambientais indicadas ao período em que ocorreram. O objetivo da pesquisa é estabelecer uma relação consistente entre o meio em que habitam a estrutura cristalina do esqueleto dos corais. A estrutura de carbonato de cálcio será caracterizada utilizando técnicas como difração de raios-X, microscopia eletrônica de varredura e espectroscopias Raman e infravermelha. Os primeiros resultados, obtidos utilizando um espécime do gênero *Mussismilia*, comprovam que o esqueleto composto de aragonita, contém traços de duas morfologias distintas dessa fase, tipos agulha e couve-flor. (3) Por imagens de MEV foram observados centros de calcificação dispersos pela microestrutura. As amostras foram ainda submetidas a tratamento térmico resultando em mudança de fase, aragonita para calcita. Serão conduzidos estudos comparativos utilizando diferentes gêneros de corais escleractíneos, coletados em diversas localidades e nativos de diferentes profundidades.

Palavras-chave: Aragonita. Microestrutura. IBFs.

Referências:

1 ROVERE, A.; ANTONIOLI, F.; BIANCHI, C. N. Fixed biological indicators. *In*: SHENNAN, I.; LONG, A. J.; HORTON, B. P. **Handbook of sea-level research**. Hoboken: Wiley, 2015. cap. 18, p. 268-280. DOI 10.1002/9781118452547.ch18.

2 ROLLION-BARD, C.; CUIF, J.-P.; BLAMART, D. Optical observations and geochemical data in deep-sea hexa- and octo-coralla specimens. **Minerals**, v. 7, n. 9., p. 154-1-154-22, 2017. DOI 10.3390/min7090154.

3 CHAKRABARTY, D.; MAHAPATRA, S. Aragonite crystals with unconventional morphologies. **Jour-**

nal of Materials Chemistry, v. 9, n. 11, p. 2953-2957, 1999.

PG19
Cold Rydberg atoms in the microwave cavity

REGUERA, C. R. M.[1]; MARCASSA, L. G.[1]
crmedero0@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Rydberg atoms are ideal platforms for many important applications, ranging from quantic computation since they have ultra-long-range interaction. Such interaction allows the generations of quantum entanglement states, i.e. create the qubit. Recently, it was proposed that such interactions can be amplified through microwaves within a magneto-optical cavity. (1) However, this process has not been widely approached experimentally. We are going to build a magneto-optical trap inside a microwave cavity to study this phenomenon and use it as a microwave sensor, which might be useful in defense area.

Palavras-chave: Rydberg atoms. Magneto-optical. Microwaves.

Referências:

1 SOMMER, C.; GENES, C. Ramsey interferometry of Rydberg ensembles inside microwave cavities. **Journal of Physics B**, v. 51, n. 11, p. 115502-1-115502-9, 2018

151

PG20

The closest vector in a lattice problem for quantum complexity

MORAZOTTI, N. A.[1]; NAPOLITANO, R. J.[1]

nicolas.morazotti@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A quantum system perturbed by the environment is prone to errors. The existence of the environment itself implies that any given eigenstate of a pure Hamiltonian rapidly decays, hampering the information storage and processing in quantum computers. We wish to minimize errors by performing the most efficient synthesis of a given evolution. An important concept to achieve this goal is quantum complexity,understood as a metric of how hard it is to synthesize a given evolution. In general, the quantum complexity of a system is the amount of gates, from a given set of universal gates, needed to produce some unitary transformation. Once we can combine gates in a number of fashions to produce the same unitary transformation, complexity is the measure of the least number of gates able to produce such unitary. As Nielsen (1) points out, to find the complexity of a given system is to find the geodesic over a Finsler manifold. In particular, to find a class of geodesics called Pauli geodesics over this manifold, one needs to solve an instance of the Closest Vector in a lattice Problem (CVP). We wish to implement the solution of the CVP by making use of artificial neural networks, following Corlay *et al.* (2) and Mohammadkarimi *et al.* (3). At first, we aim to build a machine learning algorithm able to classify the closest vector in a lattice for Pauli-symmetric Hamiltonians, that is, are diagonal in the computational basis. (1) Once this is clear, in a future step, we aim to extend the quantum complexity measure given by Nielsen (1) to non-unitary transformations given by Kraus operators.

Palavras-chave: Quantum computing. Quantum complexity. Closest vector in a lattice problem.

Referências:

1 NIELSEN, M. A. **A geometric approach to quantum circuit lower bounds**. 2005. Disponível em: https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0502070.pdf. Acesso em: 09 jun. 2021.

2 CORLAY, V. *et al.*. Neural lattice decoders. *In:* IEEE GLOBAL CONFERENCE ON SIGNAL AND INFORMATION PROCESSING, 6., 2018, Anaheim. **Proceedings...** Piscataway: IEEE, 2018. p. 569-573.

3 MOHAMMADKARIMI, M. *et al.* Deep learning-based sphere decoding. **IEEE Transactions on Wireless Communications**, v. 18, n. 9, p. 4368-4378, 2019. DOI: http://dx.doi.org/10.1109/TWC.2019.2924220.

PG21

Produção de oligossacarídeos a partir de pré-tratamentos verdes em resíduos agroindustriais e aplicação enzimática

CAPETTI, C.[1]; POLIKARPOV, I.[1]; ARNOLDI, V.[1]; DABUL, N.[1]

caiocapetti@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O reaproveitamento de resíduos agroindustriais ricos em material lignocelulósico para obtenção de produtos com valor agregado tem sido uma tendência da indústria agrícola por reduzir a quantidade de rejeitos e aumentar lucros. A fração hemicelulósica é amplamente explorada nesse contexto, em particular, o xilano, que é o principal constituinte da hemicelulose de resíduos abundantes oriundos de gramíneas, como bagaço de cana-de-açúcar e sabugo de milho. (1) No entanto, existem também materiais ricos em manano, como o grão de café, cuja utilização é, no momento, notavelmente menos estudada, ainda que este seja um produto consumido em abundância no mundo todo. (2) A estrutura do manano consiste de uma cadeia principal de resíduos de manopiranose ligados por ligações β-1,4, e, no caso particular dessa biomassa, ocorrem ramificações de resíduos de alfa-galactose, ligados por ligação α-1,6. (2) A obtenção de produtos de valor agregado a partir de rejeitos agroindustriais passa, necessariamente, pela desestruturação do material lignocelulósico, o que envolve etapas de pré-tratamento para reduzir a recalcitrância do complexo celulose-hemicelulose-lignina, e de hidrólise enzimática a fim de reduzir a complexidade da hemicelulose. Manooligossacarídeos (MOS) são produtos diretos da hidrólise do manano, que possuem propriedades pré-bióticas, anticarcinogênicas e imunomoduladoras benéficas à saúde humana e animal (3), apresentando, por essa razão, potencial para aplicação nas indústrias alimentícia e farmacêutica, por exemplo. Este projeto propõe-se a fazer determinação da composição química de borra de café, realizar a triagem de alvos enzimáticos para promover a despolimerização do galactomanano presente nesse material, caracterizar bioquimicamente tais alvos e avaliar suas eficiências na produção de MOS. Até o presente momento, dos alvos iniciais, oito beta-mananases (quatro da família GH113, duas GH26 e duas GH5), uma alfa-mananase (GH76) e uma alfa-galactosidase (GH97) puderam ser clonadas, expressas e purificadas com sucesso em teste de pequena escala. Os próximos passos envolvem a seleção de alvos, de acordo com a atividade e especificidade de cada família, expressão em larga escala e avaliação de suas propriedades bioquímicas em substratos comerciais, para, em seguida, estudar a performance dessas enzimas na produção de MOS a partir de galactomanano de borra de café. Em particular, estaremos interessados em investigar potenciais efeitos sinérgicos de alfa-galactosidase com beta-mananases, visando a remoção de ramificações do substrato e maximizando, dessa forma, o rendimento de oligossacarídeos pré-bióticos.

Palavras-chave: Mananases. Borra de café. Manooligossacarídeos.

Referências:

1 BRANDT, A. *et al.* Deconstruction of lignocellulosic biomass with ionic liquids. **Green Chemistry**, v. 15, n. 3, p. 550-583, Mar. 2013. DOI: https://doi.org/10.1039/c2gc36364j.

2 SINGH, S.; SINGH, G.; ARYA, S. K. Mannans: an overview of properties and application in food products. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 119, p. 79-95, Nov. 2018. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2018.07.130.

3 SINGH, S.; GHOSH, A.; GOYAL, A. Manno-oligosaccharides as prebiotic-valued products from agro-

waste. *In*: VARJANI, S. *et al.* (eds). **Biosynthetic technology and environmental challenges**. Singapore: Springer, 2018. p. 205-221. (Energy, Environment and Sustainability) DOI: https://doi.org/10.1007/978-981-10-7434-9_12.

PG22
Propagadores em uma teoria de campos SU(3) na rede

LEAL JUNIOR, J. M.[1]; MENDES, T. C. R.[1]
jesuel.leal@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

As interações fortes, responsáveis pela formação dos prótons, nêutrons e outros hádrons, ainda hoje não são bem entendidas. Um dos principais desafios da QCD, a teoria que descreve a interação entre quarks e glúons, que formam esses hádrons, é explicar o confinamento de suas partículas fundamentais. Acredita-se que uma possível solução para esse problema pode surgir do estudo de propriedades dos propagadores no regime de baixas energias. (1) Apresentaremos aqui os métodos de obtenção de propagadores de glúons e quarks em uma teoria SU(3) na rede e nossos resultados preliminares, a serem comparados com os já presentes na literatura. (2-3)

Palavras-chave: QCD. QCD na rede. TQC. Simulações númericas. Propagadores.

Referências:

1 VANDERSICKEL, N.; ZWANZIGER, D. The Gribov problem and QCD dynamics. **Physics Reports**, v. 520 n. 4, p. 175-251, 2012. DOI 10.1016/j.physrep.2012.07.003.
2 LEINWEBER, D. B. *et al.* Gluon propagator in the infrared region. **Physical Review D**, v. 58, n. 3, p. 031501-1-031501-5, 1998. DOI 10.1103/PhysRevD.58.031501.
3 SKULLERUD, J.; WILLIAMS, A. G. Quark propagator in Landau gauge. **Physical Review D**, v. 63, n. 5, p. 054508-1-054508-13, 2001. DOI 10.1103/PhysRevD.63.054508.

155

PG23

Espectroscopia ultrarrápida: excitação e prova degenerados e não degenerados resolvidos em polarização

GARCIA, R.[1]; BONI, L.[1]

rafaelgarcia@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A pesquisa que será desenvolvida neste projeto está relacionada com o desenvolvimento e automação de um aparato experimental de espectroscopia ultrarrápida, o qual será usado futuramente para estudos de dinâmica temporal ultrarrápidas em moléculas orgânicas e compostos inorgânicos, por exemplo nanocristais e vidros. O objetivo principal será a montagem da técnica de excitação e prova (*pump-probe*) degenerado, ou seja, com comprimentos de onda de excitação e prova iguais, e não degenerado, com comprimentos de onda distintos, e com resolução temporal em torno de 200 femtossegundos. (1) Além disso, a técnica abrangerá uma faixa espectral larga indo do UV até o infravermelho. Essa será resolvida em polarização, tendo a possibilidade de controle da polarização do feixe de excitação. Essa técnica terá por objetivo, a curto prazo, o estudo da dinâmica populacional de compostos orgânicos que apresentam processos de fotoisomerização induzidos por luz, mais particularmente azoaromáticos, os quais têm uma relaxação do estado excitado para os estados fundamentais mediados por um processo de intersecção cônica. (2) Esses processos ocorrem na escala temporal de picossegundos e são muito dependentes da energia de excitação. As vertentes deste projeto são extremamente atuais e de grande importância para ciências básicas e aplicadas, uma vez que a caracterização de materiais orgânicos e inorgânicos pode trazer informações dos estados eletrônicos excitados e como esses se comportam frente à interação com campos ópticos com diferentes polarizações e não degenerados.

Palavras-chave: Excitação e prova. Espectroscopia ultrarrápida. Azoaromáticos.

Referências:

1 NEGRES, R. A. *et al.* Experiment and analysis of two-photon absorption spectroscopy using a white-light continuum probe. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 38, n. 9, p. 1205-1216, Sept. 2002.

2 CHANG, C.-W. *et al.* Photoisomerization dynamics of azobenzene in solution with S1 excitation: a femtosecond fluorescence anisotropy study. **Journal of the American Chemical Society**, v. 126, n. 32, p. 10109-10118, Aug. 2004.

PG24

Construction of an optical cavity for experiments with Rydberg atoms

RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ, D.[1]; MARCASSA, L. G.[1]

davidrf@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Highly frequency stabilized lasers have proven to be powerful tools for experiments involving cold Rydberg atoms and cold molecules. Using commonly available technologies, these lasers can be locked into highly stabilized optical cavities. (1) We will construct an optical cavity with a finesse of ≈ 1500 for the stabilization of two lasers of different wavelengths, (960 and 780 nm, respectively), which will be based on an ultra-low expansion glass spacer (ULE). Its temperature will be stabilized using TEC elements inside of a vacuum chamber, we expect to obtain a resonant frequency variation of ~ 1MHz/day. Ultimately, this achievement should improve the sensitivity of our measurements of Rydberg-Rydberg atoms interaction applying electromagnetic induced transparency (EIT) at a relatively low cost. (2)

Palavras-chave: Optical cavity. Rydberg atoms.

Referências:

1 HOND, J. de *et al*. Medium-finesse optical cavity for the stabilization of Rydberg lasers. **Applied Optics**, v. 56, n. 19, p. 5436-5443, 2017. DOI 10.1364/ao.56.005436.
2 GURIAN, J. H. *et al*. Observation of a resonant four-body interaction in cold cesium Rydberg atoms. **Physical Review Letters**. v. 108, n. 2, p. 023005-1-023005-5, 2012. DOI 10.1103/physrevlett.108.023005.

PG25

Descoberta de padrões em geradores de números pseudo-randômicos

BISPO JUNIOR, A. G.[1]; BRUNO, O. M.[1]

altamir.bispo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A busca de padrões em sistemas não-lineares sob perturbação simulados computacionalmente apresenta desafios instigantes, em parte devido à inviabilidade da aplicação direta de técnicas e métodos clássicos que obtém resultados satisfatórios em sistemas lineares, inclusive a celebrada análise espectral. Ruídos espúrios se tornam praticamente indistinguíveis daqueles pontos de interesse quando há movimento caótico dentro do sistema. A literatura apresenta soluções que tiram vantagem da topologia do sistema (1) ou aplicam transformações difeomórficas, o que permite a simplificação do processo de análise para tais sistemas. Medidas de densidade local em ϵ-vizinhanças têm obtido sucesso na detecção de ruídos espúrios em conjuntos de dados desafiadores (2), o que viabiliza a eliminação desses ruídos. Apresentamos resultados de uma análise realizada a partir dos diagramas de Poincaré para diferentes Geradores de Números Pseudo-Randômicos, também conhecidos como PRNGs, das seguintes naturezas (i) de nível industrial implementado em software, (ii) construído a partir do mapa logístico convencional, (iii) construído a partir do k-mapa logístico. (3)

Palavras-chave: Sistema não-linear. Reconhecimento de padrões. Caos.

Referências:

1 FARMER, J. D.; SIDOROWICH, J. J. Optimal shadowing and noise reduction. **Physica D** v. 47, n. 3, p. 373-392, 1991.

2 BISPO JUNIOR, A. G.; CORDEIRO, R. L. F. Fast and scalable outlier detection with metric access methods. *In*: RODRIGUES, J. *et al.* (ed.) **Computational science**: ICCS 2019. Cham: Springer, 2019. p. 189-203. (Lecture notes in computer science, v. 11537).

3 MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Improving the pseudo-randomness properties of chaotic maps using deep-zoom. **Chaos**, v. 27, n. 5, p. 053116-1-053116-14, 2017.

PG26
Correlações magnéticas e a transição de Mott desordenada

ALMEIDA, I. C.[1]; ANDRADE, E. C.[1]
igor.almeida@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Motivados por um interesse renovado no semicondutor Si:P (fósforo dopado com silício) devido a sua possível relevância em computação quântica, nós revisitamos o antigo problema em aberto: a transição metal-isolante de Mott na presença de desordem. Para modelar este sistema, usamos a técnica RISB (bósons escravos com invariância rotacional) no modelo de Hubbard na rede quadrada (1-2), levando em conta correlações locais e desordem no hopping. Na sua formulação de sítio único, a teoria de bósons escravos em campo médio dá uma explicação atraente para a transição de Mott: ela ocorre quando as quasipartículas ficam pesadas, se localizando em um valor crítico da interação local de Coulomb, dando origem a uma fase isolante: um paramagneto sem correlações. Na presença de desordem, ilhas isolants dentro do metal levam à singularidades termodinâmicas nas vizinhanças da transição de Mott, numa região chamada de "fase de Griffiths eletrônica". (3) Nesse trabalho, nós melhoramos este cenário, incorporando correlações spin-spin entre pares de sítios, descrevendo então o isolante de Mott desordenado como um vidro de ligações de valência. Especificamente, empregamos bósons escravos, em campo médio, em um formalismo de aglomerado, com este aglomerado contendo dois sítios. Antes de estudar o problema desordenado, mais complicado, trabalhamos no modelo de Hubbard limpo, buscando mostrar que a auto-energia eletrônica é não-local e que a o peso de quasipartícula varia ao longo da superfície de Fermi. (1) Discutiremos a relevância de nossos resultados no caso desordenado e os próximos passos de nossa investigação.'

Palavras-chave: Sistemas fortemente correlacionados . Transição metal-isolante. Matéria condensada.

Referências:

1 LECHERMANN, F. *et al.* Rotationally invariant slave-boson formalism and momentum dependence of the quasiparticle weight. **Physical Review B**, v. 76, n. 15, p. 155102-1-155102-20, Oct. 2007. DOI 10.1103/physrevb.76.155102.
2 LANATÀ, N. *et al.* Slave Boson theory of orbital differentiation with crystal field effects: application to UO2. **Physiscal Review Letters**, v. 118, n. 12, p. 126401-1-126401-6, Mar. 2017. DOI 10.1103/PhysRevLett.118.126401.
3 ANDRADE, E. C.; MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVI Ć, V. Electronic Griffiths phase of the d = 2 Mott transition. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 20, p. 206403-1-206403-4, May 2009. DOI 10.1103/PhysRevLett.102.206403.

159

PG27

Viabilidade da descontaminação de órgãos (rins) para transplante utilizando técnicas fotônicas microbicidas

GOENAGA, L.[1]; VOLLET FILHO, J. D.[1]; INADA, N. M.[1]; KURACHI, C.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

lgoenagamafud@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho queremos demonstrar a viabilidade de uso de técnicas fotônicas, acopladas às máquinas de suporte aos órgãos, durante o transplante de rins, para evitar contaminação do doador para o receptor. Para isto usaremos descontaminação de líquidos circulantes e sua descontaminação bem como acoplamento de ultrassom no órgão para expelir micro-organismos. O problema tem grande impacto cientifico dentro da física aplicada, bem como impacto econômico e social. Nos últimos anos, tem sido comprovado que há um aumento de infecções por bactérias multirresistentes e resistentes, causando anualmente mais de 24.000 mortes. (1) Soma-se a isso, o fato da grande quantidade de órgãos que são deixados transplantar em decorrência da infecção desses patógenos, prejudicando 40.740 pessoas que estão em lista de espera no Brasil para transplante de órgão. (2) O transplante renal é atualmente uma atividade muito comum em países grandes como Estados Unidos, Brasil, Índia e China, melhorando assim a qualidade de vida em pacientes com insuficiência renal irreversível (doença renal crônica), que se tornou um problema. saúde pública global. O Brasil é o segundo país com mais transplantes de rins de doadores vivos e o quarto com mais doadores falecidos até o momento e nos últimos seis anos (2012-2018), a taxa de transplante desse órgão permaneceu em 28,5 pmp , aumento de 10,3% na doação renal de doadores falecidos e decréscimo de 32,9% nos doadores vivos. (2) Além disso, dados da Associação Brasileira de Transplante de Órgãos indicam que São Paulo é a cidade com mais pacientes em lista de espera para a doação de um rim, com um total de 12.000 pessoas, dados que agregam importância à pesquisa. (2) Por outro lado, o crescente problema da resistência que certos microrganismos adquiriram aos antibióticos, como as bactérias, têm a capacidade inata de encontrar novas maneiras de resistir aos tratamentos e podem transmitir material genético que permite que outras bactérias se tornem resistentes aos medicamentos. Os vírus que apresentam altas taxas de mutação que permitem uma evolução particularmente rápida, levaram à busca e necessidade de novas técnicas ou alternativas para o tratamento das mesmas. Essas alternativas correspondem a técnicas ópticas como terapia fotodinâmica (TFD) e radiação por luz ultravioleta (UV-C). Cada uma dessas técnicas tem a capacidade de inativar microrganismos com a presença de luz e, no caso da terapia fotodinâmica, usando fotossensibilizadores e oxigênio, sem a necessidade de usar antibióticos que se ajustam em uma mutação como no caso das bactérias, para sobreviver e multiplique rapidamente. A expectativa deste trabalho é eliminar ou reduzir a carga bacteriana do líquido refundido pelo órgão e dos resíduos bacterianos que permanecem no tecido do mesmo, garantindo descontaminação bem-sucedida.

Palavras-chave: Radiação ultravioleta. Descontaminação de rim. Inativação microbiana.

Referências:

1 CAMOU, T.; ZUNINO, P.; HORTAL, M. Alarma por la resistencia a antimicrobianos: situación actual y desafíos. **Revista Médica del Uruguay**, v. 33, n. 4, p. 104-127, 2017.

2 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE TRANSPORTE DE ÓRGÃOS. **Dimensionamento dos trans-**

plantes no Brasil e em cada estado (2011-2018). São Paulo: ABTO, 2018. 94 p. Disponível em: https://www.academiademedicina-ba.org.br/conteudo/not/001/cont/files/Transplantes.pdf. Acesso em: 10 jun. 2021.

PG28

Avaliação de curcuminóides naturais versus sintéticos como fotossensibilizadores em terapia fotodinâmica antimicrobiana

MELO, N.[1]; SOARES, J. C.[1]; DIAS, L.[1]; INADA, N. M.[1]

nicolas.junhiti.melo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O aparecimento e o acúmulo de resistências bacterianas têm resultado em um quadro alarmante devido ao surgimento de várias espécies bacterianas multi-resistentes. A procura por novas terapias para combate microbiano se torna essencial, destacando-se como uma das alternativas, a terapia fotodinâmica antimicrobiana (TFDA). Dentre os fotossensibilizadores naturais utilizados na TFDA, a curcumina tem despertado grande interesse devido a sua excelente ação fotodinâmica. (1) Relata-se que o uso de outros pigmentos curcuminóides em ação conjunta com a curcumina pode apresentar interações que melhoram a TFDA e potencializando a inativação de microrganismos. (2) Portanto, esse projeto busca compreender o efeito dessa interação sobre *Staphylococcus aureus* (como microrganismo modelo) e a dinâmica de degradação da curcumina na presença de luz (photobleaching). Resultados preliminares mostraram diminuição de até 4 logs de *S. aureus* na concentração de 10 μM utilizando a dose de luz de 10 J/cm^2. Esta condição será usada para testar as misturas de curcuminóides sintéticos, observando como sua interação influencia na inativação fotodinâmica. O photobleaching da curcumina natural e sintética revela a diminuição do máximo de absorção e blue shift dos dois compostos, indicando sua degradação e uma possível degradação de agregados H.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Curcumina. *Staphylococcus aureus*.

Referências:

1 DIAS, L. D. *et al*. Curcumin as a photosensitizer: from molecular structure to recent advances in antimicrobial photodynamic therapy. **Journal of Photochemistry and Photobiology C**, v. 45, p. 100384-1-100384-35, Dec. 2020. DOI 10.1016/j.jphotochemrev.2020.100384

2 SILVA, A. P. da. **Novas estratégias para o diagnóstico de onicomicose e tratamento por terapia fotodinâmica**. 2017. 195 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017. DOI 10.11606/T.76.2017.tde-11092017-151911.

162

PG29

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

PASTORE, A. M.[1]; TRAVIESO, G.[1]

alexandre.pastore@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

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.

Palavras-chave: Redes complexas.

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.

PG30
Stochastic simulation of narrow-line magneto-optical traps

SANTOS, B. N.[1]; HENN, E.[1]
bruno.nicolau.santos@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Laser cooling methods, which motivated the Nobel Prize in Physics of 1997, were revolutionary to produce and study cold atoms. They allow the experimental confirmation of the ultracold state of matter called Bose-Einstein condensate. The magneto-optical trap (MOT) (1) allows trapping and cooling atomic or molecular clouds until very low temperatures (usually the range of μK) and is the workhorse of the laser cooling experiments. Atoms in a MOT feel both a trapping and viscous force due to the scattering of photons by optical transitions. MOTs are usually composed of an inhomogeneous magnetic field and six circularly-polarized laser beams. The lowest temperature of the sample in a MOT is given by the Doppler limit ($T = \hbar\Gamma/2k_B$), which means the lower the transition linewidth Γ the lower the temperatures. When Γ is close to the photonic recoil, the single-photon scattering can significantly change the scattering probability. In this case, we have narrow-line magneto-optical traps (nMOT). Whilst there are semi-classical theories describing Doppler cooling, quantitative models for MOTs can be more challenging due to the three-dimensional polarized light in the presence of an inhomogeneous magnetic field, and the effects of optical pumping. This can be a big problem for nMOTs because the semi-classical theory fails. (2) Computational simulations are usual approaches to predict MOT properties and can be very useful to study nMOTs. (3) We develop a stochastic simulation to study the dynamics of atoms in nMOTs aiming to predict experimental values and study alternative laser-beam configurations, with a special focus on few-beams assisted by gravity to still create a trapping environment. We consider the time evolution given by a Markov chain whose transition probabilities are given by the stationary solution of the optical Bloch equations. We obtained results for strontium and dysprosium nMOTs that agree with experimental values. Currently, we have been implementing and studying trap depth in the simulation to study the dynamics.

Palavras-chave: Magneto-optical trap. Stochastic simulation. Laser cooling.

Referências:

1 RAAB, E. L., *et al.* Trapping of neutral sodium atoms with radiation pressure. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 23, p. 2631-2634, 1987.
2 LOFTUS, T. H. *et al.* Narrow line cooling and momentum-space crystals. **Physical Review A**, v. 70, n. 6, p. 063413-1-063413-14, 2004.
3 HANLEY, R. K., *et al.* Quantitative simulation of a magneto-optical trap operating near the photon recoil limit. **Journal of Modern Optics**, v. 65, n. 5-6, p. 667-676, 2018.

PG31

Avaliação in vitro da interação entre septinas e a toxina botulínica

MAMANI, E. C.[1]; ARAÚJO, A. P. U.[1]

eloy.cm@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

As neurotoxinas botulínicas (BoNTs) são potentes toxinas com atividade proteásica, que clivam proteínas SNARE provocando uma paralisia flácida. Os efeitos terapêuticos da neurotoxina botulínica sorotipo A (BoNT/A) duram de 3 a 12 meses, dependendo da indicação clínica. (1) A extraordinária longevidade da BoNT/A apresenta um desafio para o tratamento médico do botulismo, mas é vantajosa para suas aplicações terapêuticas. (2) No entanto, os mecanismos que governam a ação duradoura da BoNT/A nas células neuronais são pouco compreendidos. De fato, a estabilização da LCA pode ser um resultado da sua ligação física às proteínas relativamente estáveis do citoesqueleto, como é o caso das septinas (3), que são descritas formando suportes para o recrutamento de proteínas e regulam múltiplos eventos de sinalização. Porém, as vias específicas envolvidas na estabilização da LCA pelas septinas ainda não foram identificadas. Assim, sabendo que a estrutura de uma LCA recombinante já foi determinada e estão disponíveis, propomos os objetivos a seguir: Produzir a LCA recombinante em sistema bacteriano a fim de permitir análises da interação in vitro entre LCA e SEPT2 e SEPT7, visando determinar se há interação direta com essas septinas; paralelamente, produzir um mutante inativo da protease LCA (L428A/L429A), que já foi demonstrado in vivo ser mais susceptível à degradação e perder (no caso de SEPT2) ou reduzir drasticamente (para SEPT7) a interação com septinas. Adicionalmente, verificar se a interação de LCA ocorre também com o complexo SEPT2-6-7 e, em caso positivo, se tal interação influencia na sua polimerização e/ou estabilização. Uma vez confirmada a interação, realizar ensaios biofísicos e cristalográficos a fim de caracterizar os complexos formados em nível molecular. Em decorrência da pandemia, os experimentos, iniciados em janeiro, foram interrompidos em março e reiniciados em maio, de forma que o projeto encontra-se em fase inicial.

Palavras-chave: Septina. BoNT/A. LCA.

Referências:

1 DOLLY, J. O.; AOKI, K. R. The structure and mode of action of different botulinum toxins. **European Journal of Neurology**, v. 13, n. S4, p. 1-9, Nov. 2006.

2 MONTAL, M. Botulinum neurotoxin: a marvel of protein design. **Annual Review of Biochemistry**, v. 79, n. 2010, p. 591-617, 2010.

3 VAGIN, O. *et al*. Recruitment of septin cytoskeletal proteins by botulinum toxin A protease determines its remarkable stability. **Journal of Cell Science**, v. 127, n. 15, p. 3294-3308, Aug. 2014.

PG32

Deterministic tourist walk, an algorithm for texture analysis and classification.

MERENDA, J. V.[1]; BRUNO, O. M.[1]

joao.merenda@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Texture analysis has been an important field of computer vision and artificial intelligence with several applications, such as disease diagnosis in medical images (1), microscope images, face recognition (2), and many other applications. Textures can be divided into two main groups according to the size of the pixels set, the micro-texture and macro-texture. There are many methods for texture analysis, for example, spectral methods, model-based methods, statistical methods, etc. Although many of these methods can analyze the micro-texture, the number of techniques for macro-textures is still restricted. However, recently has arisen a novel method for texture analysis, the deterministic tourist walk (DTW), and this new method has been successful to describes different texture scales. (3) This model is an agent-based method and consists of tourists that visit cities on a map. Where the map is the image, and every pixel on the image is seen as a city. The tourist drives from a pixel to another following deterministic rules of movement. The proposed model was tested using the Brodatz dataset, an image dataset broadly used as a benchmark for texture analysis. To validate the DTW model, we compared it to some traditional texture analysis methods. It achieved good performance for texture classification.

Palavras-chave: Pattern recognition. Image processing. Texture analysis.

Referências:

1 WU, C. M.; CHEN, Y.C.; HSIEH, K. S. Texture features for classification of ultrasonic liver images. **IEEE Transactions on Medical Imaging**, v. 11, n. 2, p. 141-152, 1992.
2 ZHU, C; YANG, X. Study of remote sensing image texture analysis and classification using wavelet. **International Journal of Remote Sensing**, v. 19. n. 16, p. 3197-3203, 1998.
3 BACKES, A. R.; GONÇALVES, W. N.; MARTINEZ, A. S.; BRUNO, O. M. Texture analysis and classification using deterministic tourist walk. **Pattern Recognition**, v. 43, n. 3, p. 685-694, 2010.

PG33

Remoções consecutivas de arestas de redes complexas e seus efeitos na correlação entre grau e ativação por caminhadas aleatórias

FURUTA, R. H. M.[1]; COSTA, L. F.[1]

roberto.furuta@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Vários sistemas à nossa volta podem ser representados e entendidos como sendo compostos por entidades e suas conexões (ou interações). São exemplos desses: pessoas e relação de parentesco; modens e seus cabos; websites e hiperlinks; cruzamentos e ruas de uma cidade. Quando as características que emergem desses sistemas não correspondem a uma simples generalização do comportamento das entidades individuais, diz-se que esses são sistemas complexos. Uma abordagem convencional para modelá-los é utilizando o objeto matemático grafo, o qual é composto por vértices (entidades) e arestas (conexões). Nesse contexto, os grafos comumente recebem o nome de redes complexas. Os estudos desses objetos podem ser categorizados em: estruturais e de dinâmica. (1) O estudo estrutural (ou topológico) analisa a conformação dos nós (vértices) e conexões da rede: como é a distribuição desses, quais padrões aparecem e com que frequência, etc. Já o estudo da dinâmica consiste em analisar processos que ocorrem em cima da estrutura, como caminhadas sobre a rede, processos de sincronização, progressões epidêmicas, etc. Sabemos que grande parte das redes não são estáticas, então é natural que tenhamos interesse em avaliar o efeito de alterações topológicas em suas propriedades. Com fim de caracterizar a diversidade de estruturas que surgem quando uma rede recebe uma modificação, Silva, Comin e Costa propuseram, em 2019, uma medida nomeada maleabilidade, calculada por meio da exponencial da entropia das probabilidades de cada desdobramento possível ocorrer. (2) Aqui, apresentamos nosso trabalho, no qual estudamos o comportamento da maleabilidade de redes modelos, quando têm arestas sucessivamente removidas, selecionadas por diferentes critérios. Para o cálculo da maleabilidade é necessário estabelecer um parâmetro de avaliação do desdobramento da rede, e para isso utilizamos o coeficiente de agrupamento médio (*average clustering coefficient*), generalizado para redes dirigidas. (3) Avaliamos também o efeito dessas sequências de remoções na correlação entre grau e ativação (decorrente de caminhadas aleatórias).

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

Referências:

1 COSTA, L. da F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G.; VILLAS BOAS, P. R. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2017. DOI 10.1080/00018730601170527.

2 SILVA, F. N.; COMIN, C. H.; COSTA, L. da F. Malleability of complex networks. **Journal of Statistical Mechanics**: theory and experiment, v. 2019, n. 8, p. 083203-1-083203-15, 2019. DOI 10.1088/1742-5468/ab2ad1.

3 FAGIOLO, G. Clustering in complex directed networks. **Physical Review E** v. 76, n. 2, p. 026107-1-026107-8, 2007. DOI 10.1103/physreve.76.026107.

PG34

Mecanismos quânticos da fotoprodução energética em mitocôndrias

MEZZACAPPO, N. F.[1]; VOLLET FILHO, J. D.[1]; INADA, N. M.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

natasha.mezz@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os efeitos terapêuticos da luz têm sido bem explorados na prática, sendo uma técnica muito utilizada no tratamento de diversos alvos biológicos. (1) No entanto, o modo de ação dos fótons de luz a nível molecular ainda não é claro. Sabe-se que um dos principais alvos da luz à nível celular são as mitocôndrias, resultando principalmente no aumento da produção de adenosina trifosfato (ATP). (2) Considerando esses fatores, esse estudo pretende contribuir para o entendimento da atuação dos fótons nos processos biológicos, com foco nas mitocôndrias celulares, buscando quantificar e caracterizar essa interação em diferentes regiões espectrais. O principal objetivo deste estudo é avaliar e investigar a nível molecular o processo de interação da luz com mitocôndrias, avaliando a respiração mitocondrial em diferentes comprimentos de onda. Também serão analisadas outras propriedades, como alterações bioquímicas, utilizando microespectroscopia Raman, inchamento mitocondrial e produção de espécies reativas de oxigênio (EROs) nas condições de maiores alterações na respiração mitocondrial. Além disso, pretendemos desenvolver técnicas que proporcionem o estudo da interação fóton a fóton com a mitocôndria.

Palavras-chave: Mitocôndria. Luz. Respiração mitocondrial.

Referências:

1 HAMBLIN, M. R. Photobiomodulation or low-level laser therapy. **Journal of Biophotonics**, v. 9, n. 11-12, p. 1122-1124, 2016.
2 HAMBLIN, M. R. Mechanisms and mitochondrial redox signaling in photobiomodulation. **Photochemistry and Photobiology**, v. 94, n. 2, p. 199-212, 2018.

PG35

Descoberta de inibidores a partir de plantas do cerrado brasileiro como candidatos a compostos líderes para a malária

MOURA, I.[1]; SOUZA, G.[1]; SOUZA, L.[2]; AGUIAR, A. C. C.[3]; GUIDO, R. V. C.[1]

igormrmoura@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Estadual de Goias - UEG

[3]Universidade Federal de São Paulo - UNIFESP

A Malária é uma parasitose letal com prevalência mundial e apesar dos investimentos em busca de novas terapias medicamentosas, ainda é observado uma alta taxa de mortalidade. Na busca de novos candidatos a fármacos antimaláricos, a modulação da via glicolítica tem sido explorada como alvo para inibir o desenvolvimento do parasito e combater a infecção. A enzima enolase de *Plasmodium falciparum* (Pfeno) é um alvo atrativo da via glicolítica do parasito que catalisa a conversão de 2-fostoglicerato (2PG) em fosfoenolpiruvato (PEP). Esta enzima também está associada a outras funções celulares importantes (funções "moonlighting", funções não-glicolíticas), devido aos diferentes compartimentos biológicos nos quais é encontrada.(1) Nosso grupo determinou a estrutura ristalográfica 3D da Pfeno juntamente com os seus complexos enzimáticos, cujas diferenças estruturais em comparação com a enzima homóloga humana permitirão a descoberta de novos inibidores seletivos.(2) Tendo em vista o sucesso dos fármacos antimaláricos provenientes de produtos naturais (PN) e que o Cerrado é uma fonte promissora da biodiversidade mundial, neste trabalho visamos a investigação de compostos bioativos deste importante bioma brasileiro frente ao parasita causador da malária. Ensaios iniciais de avaliação da atividade antiplasmodial de extratos de *Qualea grandiflora, Dalbergia miscolobium, Tabebuia ochraceae, Pterodon pubescens* (folhas), *Geissospermum sericeum*, Carapanauba e *Maytenus guyanensis Klotzch* mostraram que 9 deles apresentaram valores de inibição acima de 90% na concentração de 50 μg/mL, indicando que valores os valores de IC_{50} seriam abaixo de 10 μg/mL. Esses extratos foram selecionados para avaliação da inibição da Pfeno. Os compostos isolados que apresentarem inibição significativa da enzima ($IC_{50}^{Pfeno} < 1$ μM) e do crescimento do parasita ($IC_{50}^{Pf} < 1$ μM) com índices de seletividade promissores (SI > 10) serão selecionados para estudos in vivo para a comprovação da eficácia em modelo animal e confirmação da descoberta de novos candidatos a compostos líderes para a malária.

Palavras-chave: Malária. Plasmodium falciparum. Enolase

Referências:

1 VIVAS, L. *et al.* Plasmodium falciparum: stage specific effects of a selective inhibitor of lactate dehydrogenase. **Experimental Parasitology**,v. 111,n.2, p. 105–114,2005.

2 MALUF, F. V. **Estudos estruturais e de química medicinal aplicados às enzimas da via glicolítica de protozoários:** enolase de Plasmodium falciparum e gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase de Trypanosoma cruzi. 2015. 153p. Tese (Doutorado em Ciencias) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2015.

PG36
A false vacuum Skyrme model for nuclear matter

LIVRAMENTO, L. R.[1]; FERREIRA, L. A.[1]

leandrorl@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

We construct a Skyrme-type model based on self-duality ideas of (1) that reproduces, with good accuracy, some bulk properties of nuclei, like radii and binding energies, for a very wide range of the mass number. The action of the proposed theory is a direct sum of two terms. The first term is the self-dual Skyrme model (2), which has a static energy proportional to the baryonic charge due to the self-dual equations. The second term is made by a kinetic and potential term defined only in terms of the density of the baryonic charge, which is treated as a fluid. The outcome is that the dynamics reduces to Coleman's false vacuum problem for a scalar field that is a fractional power of that density. The proposed theory has simple and robust properties that well capture the mass properties of nuclear matter for different types of potentials. Furthermore, we indicate how it could perhaps be improved to describe other properties of the nuclei or increase the mass number range in agreement with the experimental data.

Palavras-chave: Self-duality. False vacuum. Skyrme.

Referências:

1 ADAM, C.; FERREIRA, L. A.; HORA, E. da; WERESZCYNSKI, A.; ZAKRZEWSKI, W. J. Some aspects of self-duality and generalised BPS theories. **Journal of High Energy Physics**, v. 2013, n. 8, p. 062-1-062-25, Aug. 2013.
2 FERREIRA, L. A. Exact self-duality in a modified Skyrme model. **Journal of High Energy Physics**, v. 2017, n. 7, p. 039-1-039-13, July 2017.

170

PG37

Mecanismos de propagação do ultrassom no tecido biológico para sua aplicação na terapia sono-fotodinâmica

ANTUNES, C. A.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]

camila.antunes@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A terapia fotodinâmica (TFD) é um procedimento não invasivo utilizado na remoção de células cancerígenas, em especial as células de câncer não melanoma. Para isso, esta terapia se utiliza da combinação de luz, uma droga sensível a luz, chamada de fotossensibilizador (FS), e oxigênio molecular (O2), responsável por causar a morte celular. (1) A interação da luz com o tecido biológico é modelada matematicamente através de equações de taxa e visualizada em simulações computacionais relativas à distribuição de luz no tecido. (2) Uma importante limitação da TFD consiste na reduzida penetração da luz, devido a sua atenuação ao percorrer as diferentes camadas de tecido. Isso faz com que a utilização da mesma seja eficaz apenas para o tratamento de lesões superficiais e não pigmentadas, trazendo a necessidade do estudo e entendimento de diferentes técnicas não invasivas para o tratamento de lesões mais profundas. Um método alternativo para o tratamento do câncer é a chamada terapia sonodinâmica (TSD), que consiste na utilização de ondas de ultrassom (US) de baixa frequência e um sonosensibilizador (SS), e possui um protocolo de aplicação semelhante a TFD, no qual o SS aplicado no paciente interage com as ondas de US levando à morte celular. Ao contrário da luz, o US atravessa facilmente tecidos biológicos devido a sua baixa atenuação, o que permite que esta terapia atinja tumores mais profundos. Além disso, o US pode ser altamente focado em pequenas áreas permitindo maior controle do tratamento. (3) Apesar disso, ainda não existem modelos capazes de descrever com precisão o comportamento do US quando propagado no tecido biológico. O objetivo deste trabalho consiste em compreender e propor mecanismos de interação do US com o tecido biológico a partir de modelos teóricos capazes de descrever a propagação de tais ondas através das diferentes camadas de tecido. A dependência com a frequência do US, geometria da fonte e características do tecido serão consideradas nesses modelos objetivando desenvolver uma futura aplicação otimizada no tratamento do câncer de pele através da combinação das terapias foto e sonodinâmica. Para isso, nesta fase inicial, a fim de se obter maiores informações a respeito da interação do US com o tecido, está sendo realizado um levantamento bibliográfico dos estudos realizados até momento a respeito do comportamento das ondas sonoras no corpo humano, em especial seu poder de penetração, propagação, intensidade e reflexão no tecido biológico, levando em consideração as propriedades acústicas das diferentes camadas de tecidos, através de modelos simulados computacionalmente. A análise realizada até o momento tem mostrado que, apesar de já existirem diversos estudos que fazem a aplicação do US no corpo humano para as mais diferentes finalidades, a quantidade de estudos teóricos das propriedades do US no tecido biológico objetivando a aplicação na TSD ainda é pequeno, o que evidência a importância do melhor entendimento da interação som-tecido para a elaboração de um modelo computacional capaz de descrever o comportamento do som através do corpo afim de elaborar de um protocolo seguro para aplicação no tratamento do câncer de pele.

Palavras-chave: Terapia sono-fotodinâmica. Propagação do ultrassom. Tecido biológico.

Referências:

1 PLAETZER, K. *et al.* Photophysics and photochemistry of photodynamic therapy: fundamental

aspects. **Lasers in Medical Science**, v. 24, n. 2, p. 259-268, 2009.
2 SANCHEZ GUACHAMÍN, V. J. **Theoretical evaluation of the light distribution and PDT dose for a multi-wavelength light source**. 107 p. 2019. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.
3 NENE, L. C. *et al*. Effect of ultrasonic frequency and power on the sonodynamic therapy activity of cationic Zn (II) phthalocyanines. **Journal of Inorganic Biochemistry**, v. 217, p. 111397-1-111397-12, Apr. 2021. DOI 10.1016/j.jinorgbio.2021.111397.

172

PG38

Modulated optical tweezers as a dynamical tool for stochastic thermodynamics

MARTINS, T. T.[1]; KAMIZAKI, L. P.[1]; MUNIZ, S. R.[1]

thalyta@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Since the development of the first thermal engines, the study of thermodynamics has been extremely important, describing numerous processes on a macroscopic scale involving energy, work, heat, and their exchanges and relationships. Nevertheless, many conceptual open questions existed throughout history and still do today, especially when decreasing a system's size. (1) Despite that, the interest in the field has resurged just in the last decades due to new theoretical ideas and technological developments. One such technology is optical tweezers, as they have become one of the leading and most versatile tools for manipulating micro and nanoscale systems. (2) Our homebuilt setup is simple, consisting mostly of an infrared laser, a high numerical aperture objective, responsible for focusing the laser beam, and an acousto-optic modulator (AOM) to shape the light distribution and control it dynamically. When a microscopic dielectric particle approximates to the focus, it feels an approximately harmonic potential whose parameters (trap stiffness and equilibrium position) can be dynamically controlled over time. Thus, instead of driving a system from one state to another using macroscopic quantities like pressure, volume, or chemical potential, we can control the shape of the optical trapping potential locally and dynamically. Combining high-speed modulation and detection, we can readily explore many interesting features of Brownian particles, using several methods as low and high-frequency modulation, feedback trapping, etc. (3) Currently, we are developing different experimental tests, with colloidal particles, ranging from the verification of Fluctuation Theorems to optimization of protocols for minimal energy dissipation. Using dynamic modulation of the optical potential, we can apply micro and nanoscale tasks, with the possibility of quickly driving the system out of the equilibrium regime.

Palavras-chave: Stochastic thermodynamics. Optical tweezers. Dynamic optical potentials. Acousto-optic modulation.

Referências:

1 BUSTAMANTE, C.; LIPHARDT, J.; RITORT, F. The nonequilibrium thermodynamics of small systems. **Physics Today**, v. 58, n. 7, p. 43, July 2005.
2 JONES, P. H.; MARAGÒ, O. M.; VOLPE, G. **Optical tweezers**: principles and applications. Cambridge: Cambridge University Press, 2015.
3 MARTINS, T. T. **Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos**. 2019. 161 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019. DOI: https://doi.org/10.11606/D.76.2019.tde-12092019-141442.

173

PG39

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

RIGHETTO, G. M.; LOPES, J. L. S.; SANTOS FILHO, N. A.; BELTRAMINI, L. M.[1]; CILLI, E. M.; CAMARGO, I. L. B. C.[1]

gmrighetto@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Apesar dos avanços no tratamento de doenças infecciosas, microrganismos patogênicos continuam ameaçando a saúde pública. (1) A escassez de opções terapêuticas leva ao interesse em novos compostos. Por isso, peptídeos antimicrobianos, como Bothropstoxina-I (2) e Plantaricina 149 (3), estão sendo revisitados por terem atividades antibacterianas que podem ser aperfeiçoadas. Este estudo objetivou otimizar a ação destes compostos, modificando os peptídeos, que foram sintetizados em fase sólida. A concentração inibitória mínima (CIM) para bactérias patogênicas (*Staphylococcus epidermidis* ATCC 35984, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Enterococcus faecalis* ATCC 29212, *Enterococcus faecium* ATCC 700221, *Klebsiella pneumoniae* ATCC 700603, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Acinetobacter baumannii* ATCC 19606 e *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853) e a hemólise de eritrócitos humanos foram indicadores usados na avaliação da otimização das atividades dos análogos sintetizados. Os peptídeos escolhidos foram NA1897, (KKWRWHLKPW)2K e Pep20 (FMOC-KAVKKLFKKWG) para a Bothropstoxina-I e Plantaricina 149, respectivamente, por apresentarem a melhor atividade antimicrobiana e a menor taxa hemolítica. As CIMs de Pep20 e NA1897 foram determinadas para 60 bactérias de espécies, linhagens e perfis de resistência diferentes, indicando amplo espectro de ação de ambos. As cinéticas de morte de duas linhagens de *S. aureus* (CIM 16 mg/L para NA1897, 8 mg/L para Pep20) e duas linhagens de *A. baumannii* (CIM 32 mg/L para NA1897, 32 e 64 mg/L para Pep20) foram determinadas para cada um dos peptídeos, resultando em ação rápida característica dos peptídeos antimicrobianos, com redução total de sobreviventes em no máximo duas horas para todas as concentrações testadas. Em ambos a concentração subinibitória foi capaz de reduzir o inóculo bacteriano em pelo menos 2,5 log. Com estes resultados confirmamos o potencial bactericida dos peptídeos. O efeito pós antibiótico destes peptídeos também foi avaliado nas mesmas linhagens. Os efeitos pós antibiótico em gram-positivos e gram-negativos foram de pelo menos 8,5 h e 4 h para NA1897, e 5 h e 2,5 h para Pep20, respectivamente. Esses dados podem influenciar na posologia e otimização da farmacocinética. Para estudar os modos de ação destes peptídeos, uma seleção de isolados resistentes foi realizada *in vitro*, através de passagens seriadas das linhagens em concentrações subinibitórias de NA1897 e Pep20. Em 30 dias, observou-se um aumento de 8x a CIM inicial de Pep20, tanto para *S. aureus* quanto para *A. baumannii*. Houve um aumento de 16x a CIM inicial de NA1897 para *S. aureus*, porém a CIM para *A. baumannii* não mudou. Genes que codificam o alvo de NA1897, proteínas das vias de entrada deste na célula, ou ainda bombas de efluxo, podem ter sido mutados, aumentando a CIM em gram-positivos. Por outro lado, em gram-negativos, a atividade de NA1897 permaneceu estável. Por fim, duas moléculas foram selecionadas com atividades antibacterianas otimizadas. O sequenciamento do genoma das linhagens resistentes selecionadas será fundamental para verificar os mecanismos de resistência e, consequentemente, indicar possíveis modos de ação dessas moléculas. Outros ensaios como observação da célula em microscopia eletrônica (transmissão e confocal), despolarização de membrana e inibição de enzimas topoisomerases serão usados para investigar o modo de ação destes peptídeos.

174

Palavras-chave: Antimicrobianos. Peptídeos.

Referências:

1 MULANI, M. S. *et al.* Emerging strategies to combat ESKAPE pathogens in the era of antimicrobial resistance: a review. **Frontiers in Microbiology**, v. 10, p. 539-1-539-24, Apr. 2019. DOI 10.3389/fmicb.2019.00539.
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, n. 11, p. 1898-1-1898-14, 2017.
3 LOPES, J. L. de S. *et al.* Interaction of antimicrobial peptide Plantaricin149a and four analogs with lipid bilayers and bacterial membranes. **Brazilian Journal of Microbiology**, v. 44, n. 4, p. 1291-1298, 2013.

175

PG40

FlowMR: um protótipo baseado no modelo a fluxo de dados dinâmico, escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo

SILVA JUNIOR, J. T.[1]; MATIAS, P.[2]; RUGGIERO, C. A.[1]

jtsjunior@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Desde os primórdios da computação eletrônica como conhecemos, a única estratégia aplicada para ganho em desempenho se baseou na predição empírica obtida a partir de uma extrapolação da *Lei de Moore*. De acordo com essa hipótese, com a evolução da tecnologia, seria possível o aumento indefinido na frequência de operação dos processadores, garantindo melhor desempenho naturalmente. Entretanto, nas últimas décadas, esse limite finalmente foi alcançado e foi possível verificar limitações físicas que impedem um avanço significativo nesta frequência de operação (1), dentre os quais pode-se destacar o princípio da incerteza de *Heisenberg*, ou mesmo a dissipação natural da potência em calor. Com isso, é possível destacar um crescente interesse na exploração do paralelismo para fins de ganho em desempenho computacional, a partir da exploração de cada vez mais núcleos de processamento na estratégia que ficou conhecida como *multi-cores*. Porém, principalmente a fim de garantir retro compatibilidade com famílias de processadores mais antigas, mantendo as mesmas estratégias de compilação, pouca evolução foi empregada em nível de arquitetura de computadores. Dessa forma, para explorar todo o potencial de paralelismo presente nas soluções computacionais atuais, é necessário grande conhecimento do programador sobre a implementação dessas estratégias, a fim de obter capacidades para ganho em desempenho que sejam realmente apreciáveis. A fim de reduzir a dependência do programador em extrair as capacidades de paralelismo do processador, diversos paradigmas de computação paralelas foram explorados desde o advento da computação. Dentre estas abordagens, uma que se destaca por sua simplicidade e capacidade de exploração de paralelismo, é o paradigma da computação dirigida por dados, segundo a qual as instruções presentes no programa que se deseja executar são ativadas a partir da disponibilidade de todos os recursos necessários para sua execução. Com isso, o paralelismo passa a se tornar intrínseco à arquitetura do processador. (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 desta estratégia é a fina granularidade de seu conjunto de instruções, o que 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, este projeto procura aumentar a granularidade desta máquina, distribuindo as ações dos programas entre múltiplas instâncias da MDFM, no conceito conhecido como Multianel. (3) 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, é buscado o aumento indefinido na quantidade de unidades de processamento, em um sistema paralelo.

Palavras-chave: Arquiteturas da computadores. Fluxo de dados.

Referências:

1 MARKOV, I. L. Limits on fundamental limits to computation. **Nature**, v. 512, n. 7513, p. 147-154, Aug. 2014.
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 Computing**, v. 3, n. 3, p. 305-327, Sept. 1986.

177

PG41

Modeling the effects of social distancing on the large-scale spreading of diseases

VENTURA, P. C.[1]; ALETA, A.[2]; RODRIGUES, F. A.[3]; MORENO, Y.[4]

paulo.pc.vs@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Institute for Scientific Interchange - ISI Foundation

[3]Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

[4]Institute for Biocomputation and Physics of Complex Systems - BIFI/UNIZAR

Infectious diseases that transmit from human to human are subject to strong influence from behavioral responses by the population.(1) Non-pharmaceutical interventions (NPIs) aimed at reducing the interactions between individuals can be implemented, being specially useful when pharmaceutical measures, such as vaccines, are not available. One example of the former kind of measures is social distancing, which can be either policy-driven or can arise endogenously in the population as a consequence of the fear of infection. However, if NPIs are lifted before the population reaches herd immunity, further reintroductions of the pathogen would lead to secondary infections. In this work, we use analytical and computational modeling tools to study the effects of different social distancing schemes on the large scale spreading of diseases. Specifically, we generalize a previously proposed model for social distancing (2) to be applied at the subpopulation level of metapopulations (3), considering short and long term strategies that are fed with local or global information about the epidemics. For the epidemic component, we employ a *Susceptible-Infectious-Removed* (SIR) model, and for mobility we use a synthetic random geometric network (RGN) with links weighted proportionally to the populations at both ends. We show that, with the proposed formulation, different model ingredients might lead to very diverse outcomes in different subpopulations. We also use convenient metrics to compare the efficiency between local and global strategies, showing that each one may be more appropriate in different scenarios. Finally, we evaluate the consequences of suddenly lifting the NPI mechanisms, showing that multiple global and local outbreaks may occur. Our results suggest that there is not a unique answer to the question of whether contention measures are better implemented and managed locally or globally and that model outcomes depend on how the full complexity of human interactions is taken into account.

Palavras-chave: Epidemic spreading. Metapopulation. Social distancing.

Referências:

1 FUNK, S.; SALATHÉ, M.; JANSEN, V. A.A. Modelling the influence of human behaviour on the spread of infectious diseases: a review. **Journal of the Royal Society Interface**, v. 7, n. 50, p. 1247-1256, 2010.

2 EKSIN, C.; PAARPORN, K.; WEITZ, J. S. Systematic biases in disease forecasting – the role of behavior change. **Epidemics**, v. 27, p. 96-105, 2019.DOI 10.1016/j.epidem.2019.02.004.

3 COLIZZA, V.; VESPIGNANI, A. Epidemic modeling in metapopulation systems with heterogeneous coupling pattern: theory and simulations. **Journal of Theoretical Biology**, v. 251, n. 3, p. 450-467, 2008.

178

PG42
Perturbing the Kitaev spin liquid with disorder

MEIRELES, V. D.[1]; ANDRADE, E. C.[1]
vitordmeireles@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The Kitaev honeycomb model provides a paradigmatic example of exactly solvable quantum spin liquid (QSL), in which the spin degrees of freedom fractionalize into itinerant Majorana fermions coupled to a static background of Z_2 gauge fluxes. (1) This model has attracted significant attention in recent years due to the possibility of its experimental realization in some spin-orbit Mott insulators. Amongst the various candidates to host the Kitaev spin liquid phase, the iridate compound H$_3$LiIr$_2$O$_6$ has a prominent role due to the absence of long-range magnetic order in low temperatures, which is a distinct feature of a QSL state. (2) Another important aspect observed in this material is the presence of magnetic disorder, which may induce a distinct thermodynamic behavior in comparison to the clean model. (2-3) Motivated by this experimental scenario, we consider the Kitaev honeycomb model in the presence of an external magnetic field, where the system behaves as a gapped topological QSL, hosting chiral edge states labeled by a topological number. In addition to the field, we also consider a relevant perturbation coming from the non-Kitaev interactions which gives rise to possible different static flux configurations in the ground state and, therefore, preserves the model's exact solvability. Our aim is to study the effects of bond-disorder and vacancies in this extended model, using the spectrum obtained via exact diagonalization. The robustness of the chiral edge states in the presence of disorder is investigated using the Bott index formula, a real space topological index equivalent to the Chern number, complemented by an analysis of the spectrum statistics.

Palavras-chave: Spin-Liquid. Disorder. Topology.

Referências:

1 KITAEV, A. Anyons in an exactly solved model and beyond. **Annals of Physics**, v. 321, n. 1, p. 2-111, Jan. 2006.
2 KITAGAWA, K. *et al.* A spin-orbital-entangled quantum liquid on a honeycomb lattice. **Nature**, v. 554, n. 7692, p. 341-345, Feb. 2018.
3 KNOLLE, J.; MOESSNER, R.; PERKINS, N. B. Bond-disordered spin liquid and the honeycomb iridate H3LiIr2O6: abundant low-energy density of states from random Majorana hopping. **Physical Review Letters**, v. 122, n. 4, p. 047202-1-047202-6, Feb. 2019.

PG43

Macrófagos associados à leucemia promielocítica aguda como transportadores de nanoterapêuticos à células leucêmicas via interação de receptores CD44 e ácido hialurônico

ANTONIO, L.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]; RIBOVSKI, L.[2]

luana.antonio@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]University of Twente - UT

As células leucêmicas recrutam os macrófagos e induzem sua polarização para fenótipos pró-leucêmicos, principalmente na medula óssea e baço. Tais macrófagos favorecem a progressão da doença e resistência a fármacos, reduzindo a sobrevida dos pacientes. (1) Entretanto, como os macrófagos possuem um tempo de meia-vida longo no sangue e um direcionamento natural a células cancerosas, podem também atuar como depósitos e transportadores de nanopartículas carreadoras (NCs) em terapias contra o câncer. Estas células são recrutadas por tumores e aumentam a acumulação de NCs em tecidos tumorais. (2) Em leucemias, a formação de tumores sólidos não é comum, no entanto a interação das células leucêmicas com macrófagos também ocorre. (1) O CD44 é um receptor expresso em macrófagos que se liga ao ácido hialurônico (AH) e apresenta níveis de expressão distintos para diferentes polarizações dos macrófagos. (3) A fim de avaliar a capacidade dos macrófagos de efetivamente entregar nanoterapêuticos a células leucêmicas, estudamos sua interação com NCs em co-culturas de macrófagos e células leucêmicas. Três configurações de NCs a base de poli (ácido lático-co-ácido glicólico) (PLGA) serão avaliadas, a saber: i) NCs modificados com polietileno glicol (PEG), para evasão do sistema imune; ii) NCs modificados com ácido hialurônico, para interação com macrófagos via receptor CD44 e iii) NCs não-modificados. Os diâmetros dos NCs estão distribuídos homogeneamente (PdI $<$ 0,15) sendo 136 $\pm$ 25, 141 $\pm$ 28, 179 $\pm$ 60 nm para os NCs de PLGA, PLGA-PEG-AH e PLGA-PEG, respectivamente. A eficiência da modificação dos NCs com AH foi determinada por ensaio turbidimétrico e é de 50 $\pm$ 8%. Macrófagos previamente expostos a NCs serão cultivados em co-cultura com células de leucemia mieloide aguda e a internalização e entrega dos NCs às células leucêmicas será analisada por citometria de fluxo. Para avaliar a eficácia desses nanocarreadores contra células leucêmicas, formulações contendo trióxido de arsênio, um fármaco comumente utilizado no tratamento de leucemia mieloide aguda, serão analisadas quanto à viabilidade celular.

Palavras-chave: Nanocarreadores. Macrófagos. Leucemia. Nanomedicina.

Referências:

1 LI, Y. *et al.* The role of tumor-associated macrophages in leukemia. **Acta Haematologica**, v. 143, n. 2, p. 112-117, Mar. 2020. DOI 10.1159/000500315.

2 XIA, Y. *et al.* Engineering macrophages for cancer immunotherapy and drug delivery. **Advanced Materials**, v. 32, n. 40, p. 2002054-1-2002054-20, 2020. DOI 10.1002/adma.202002054.

3 LA ROSA, J. M. R. de *et al.* The CD44-mediated uptake of hyaluronic acid-based carriers in macrophages. **Advanced Healthcare Materials**, v. 6, n. 4, p. 1601012-1-1601012-11, 2017. DOI 10.1002/adhm.201601012.

180

PG44

Estrutura molecular que incorpora scaffolds de quinazolina e chalcona para o desenvolvimento de híbridos anticâncer

SOUZA, M. S.[1]; RUSSOWSKY, D.[2]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

msouza@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Quimica - UFRGS

Durante o século XX, após o fim da Primeira Guerra Mundial, com os avanços em pesquisas no campo da radioterapia e com o surgimento das primeiras ligas contra o câncer, a doença passou por um enquadramento, indo de enfermidade individual vinculada à urbanização e à industrialização para um problema de saúde pública relacionado às dificuldades de acesso e funcionamento dos serviços de saúde.(1) No Brasil, o processo o transformou em uma presença marcante no cotidiano e em vigorosa preocupação social. Recente reporte da Agência Internacional para Pesquisa em Câncer apresenta uma previsão de que até o ano de 2040 estarão notificados 29,5 milhões de casos de câncer no mundo, com um acúmulo de 16,4 milhões de mortes. Os quatro cânceres sólidos mais prevalentes são os que apresentam tumor maligno no pulmão, mama feminina, intestino e próstata.(2) A progressão metastática é um processo complexo e clinicamente difícil, com migração, invasão e angiogênese sendo as principais características. A invasão de células ao tecido circundante é comum na evolução tumoral e um passo inicial para a metástase. Este fenômeno requer o início da migração celular, a qual envolve a modulação da tubulina. No processo de invasão celular, as células migram para o compartimento estromal, onde têm livre acesso aos vasos sanguíneos e linfáticos. Ao penetrar nas paredes dos vasos estas células são carregadas pelo sistema circulatório para locais distantes (3). Neste trabalho de doutorado estamos desenvolvendo candidatos à agentes antitumorais e antimetastáticos por meio da integração de métodos *in silico* e *in vitro* em Química Medicinal. O planejamento de novos compostos tem como pilar uma série sintética híbrida de quinazolina-chalconas. 10 compostos foram investigados por meio de ensaios celulares para a identificação de moléculas citotóxicas *in vitro*. Para isto, linhagens de câncer de mama (MDA-MB-231), de fibroblastos murinos saudáveis (FC3H) e de fibroblastos humanos saudáveis (HFF-1) foram avaliadas quanto à potência a partir da determinação dos seus valores de IC50, bem como a capacidade de inviabilizar seletivamente as células tumorais. Foram identificados 8 *hits* com valores de IC50 $\leq$ 20 μM em MDA. Destes, 3 compostos se mostraram seletivamente citotóxicos (IS $>$ 3) frente ambos os fibroblastos, sendo eles: AQC-02 (**a**); AQC-06 (**b**) e AQC-10 (**c**). A caracterização da atividade contra um fenótipo também foi avaliada para os compostos triados, os quais inibiram a migração celular em ensaios qualitativos *wound healing* concentração única e dose-resposta. Os resultados apontaram para o envolvimento das moléculas na interrupção de processos relacionados às condições patológicas e o quão promissores são para avançar para os ensaios cinéticos direcionados ao alvo macromolecular. Antes disto, estudos quantitativos em câmara de Boyden revelaram que os compostos **a-c** apresentaram IC50 migração celular de 2,78 $\pm$ 0,23; 1,26 $\pm$ 0,10 e 4,28 $\pm$ 0,25 μM e IC50 invasão celular de 2,66 $\pm$ 0,35; 1,28 $\pm$ 0,22 e 4,36 $\pm$ 0,41 μM, respectivamente. Desta forma, este trabalho vem acumulando dados importantes que corroboram as decisões tomadas na triagem de candidatos a fármacos visando o tratamento do câncer de mama triplo-negativo e metastático.

Palavras-chave: Câncer de mama. Ensaios celulares. Migração e invasão celular.

Referências:

1 TEIXEIRA, L. A.; FONSECA, C.O.. Sobre a história social do câncer. *In*:TEIXEIRA, L. A.; FONSECA, C.O. **De doença desconhecida a problema de saúde pública:** o INCA e o controle do câncer no Brasil. Rio de Janeiro: Ministério da Saúde,2007. p. 13-24.
2 THE ICGC/TCGA PAN-CANCER ANALYSIS OF WHOLE GENOMES CONSORTIUM. Pan-cancer analysis of whole genomes. **Nature**, v. 578, n. 7793, p. 82, 2020.
3 FRIEDL, P.; ALEXANDER, S.. Cancer invasion and the microenvironment: plasticity and reciprocity. **Cell**, v. 147, n. 5, p. 992-1009, 2011.

182

PG45

Combinação de antibiótico com inativação fotodinâmica para o tratamento de infecções bacterianas

SOARES, J. M.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; BLANCO, K.[1]

jennifer.soares@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente projeto tem como objetivo avaliar se a inativação fotodinâmica (IFD) potencializar a ação dos antibióticos. Desde sua descoberta, os antibióticos tem sido a principal terapia empregada para tratar infecções bacterianas, contudo, o número de casos de cepas bacterianas resistente a diversas classes de antibiótico tem sido alarmante. A perspectiva para 2050 é que o número de morte por infecção de bactérias resistentes causará até 10 milhões de morte por ano, superando a mortalidade por câncer. (1) Diante deste cenário, a IFD têm-se destacado como um tratamento alternativo a antibioticoterapia, dado que não há relatos na literatura de resistência bacteriana, pois a IFD baseia-se na combinação de três componentes: fotossensibilizador, luz e oxigênio molecular. (2) Neste estudo foi avaliado dois protocolos de combinação da IFD com os antibióticos: estresse oxidativo (IFD depois a adição de antibiótico) e incorporação fotoquímica (antibiótico irradiado junto como o fotossensibilizador). Os resultados demonstram que as condições de IFD influenciam a resposta ao antibiótico, o que pode resultar em condições sinérgicas ou antagônicas por análise do modelo de independência de Bliss. (3) Nas condições estudadas, a metodologia do estresse oxidativo foi a que mais potencializou o efeito dos antibióticos.

Palavras-chave: Inativação fotodinâmica. Antibiótico. Resistência bacteriana.

Referências:

1 BAQUERO, F.; LEVIN, B. R. Proximate and ultimate causes of the bactericidal action of antibiotics. **Nature Reviews Microbiology** , v. 19, n. 2, p. 123-132, Feb. 2021.

2 LIU, Y. *et al.* Antibacterial photodynamic therapy: overview of a promising approach to fight antibiotic-resistant bacterial infections. **Jourmal of Clinical and Translational Research**, v. 1, n. 3, p. 140-167, Dec. 2015.

3 COURTNEY, C. M. *et al.* Potentiating antibiotics in drug-resistant clinical isolates via stimuli-activated superoxide generation. **Science Advances**, v. 3, n. 10, p. e1701776-1-e1701776-10, Oct. 2017.

PG46

Anisotropias magneticamente induzidas na direção de chegada de UHECR de radiogaláxias próximas

OLIVEIRA, C.[1]; SOUZA, V.[1]

caina.oliveira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

As fontes de raios cósmicos ultra energéticos (UHECR - *Ultra High Energy Cosmic Rays*) constituem uma das questão em aberto mais importantes da astrofísica atual. A identificação de um objeto astrofísico que atue como fonte das partículas mais energéticas conhecidas se caracterizaria um avanço extraordinário para a física contemporânea, visto que: (a) há grande debate quanto aos mecanismos de aceleração, que em geral são diferentes para cada tipo de fonte; (b) não sabemos a importância dos UHECR no balanço energético do Universo. Grande parte da dificuldade de identificação da fonte reside na ausência de conhecimento sobre os campos magnéticos extragalácticos que preenchem o Universo e desviam os UHECR. Neste trabalho foram realizadas simulações detalhadas da direção de chegada de UHECR emitidos de três radiogaláxias próximas - Centaurus A, Virgo A e Fornax A. Nas simulações foram utilizados os modelos de campos magnéticos extragalácticos estruturados mais recentes desenvolvidos. (1) As simulações foram realizadas no CRPropa3.0 (2), levando em consideração todas as interações relevantes dos UHECR com campos de radiação de fundo do Universo. As direções de chegada e direções dos dipolos calculados foram comparadas com os resultados experimentais dos Observatórios Pierre Auger e Telescope Array. Os resultados obtidos evidenciam que estas três fontes podem explicar a direção do dipolo de mais alta energia (>32 EeV) e os excessos de eventos detectados para energias maiores que 60 EeV. As simulações foram estendidas para a galáxia próxima M82, considerada a responsável pelo excesso de eventos medido pelo Telescope Array. (3) Encontramos que esta galáxia não contribui para o excesso de eventos do Telescope Array no caso de campo magnético extragaláctico estruturado.

Palavras-chave: Anisotropia. UHECR. Radiogaláxias.

Referências:

1 HACKSTEIN, S. *et al.* Simulations of ultra-high energy cosmic rays in the local Universe and the origin of cosmic magnetic fields. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v. 475, n. 2, p. 2519-2529, 2018.

2 BATISTA, R. A. *et al.* CRPropa 3: a public astrophysical simulation framework for propagating extraterrestrial ultra-high energy particles. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2016, n. 5, p. 038-1-038-22, 2016.

3 ABBASI, R. U. *et al.* Evidence for a supergalactic structure of magnetic deflection multiplets of ultra-high-energy cosmic rays. **The Astrophysical Journal**, v. 899, n. 1, p. 86-1-86-13, 2020.

PG47

Estudo teórico e experimental da desaceleração de um feixe supersônico de Rb2.

TORRES, M. L.[1]; MARCASSA, L. G.[1]; CARDOSO, M.[1]

lefran@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a descoberta das técnicas de resfriamento e captura de átomos por lasers (1), a física atômica viu muitos avanços na manipulação e controle de átomos. É natural querer estender o método de resfriamento a laser dos átomos às moléculas. Na verdade, muitos estudos e aplicações são possíveis a partir de uma amostra densa e fria de moléculas: espectroscopia de alta resolução, estudo de interações dipolares, exploração de química ultrafria onde as reações são controláveis no nível quântico, realização de medições precisas de constantes universais, como o momento de dipolo do elétron ou a constante de estrutura fina. (2) Neste trabalho, projetamos e montamos um sistema experimental para a produção de um feixe supersônico de moléculas diatômicas de rubídio (Rb2), assim como uma primeira caracterização do referido feixe. Este é o primeiro passo de uma nova montagem experimental para resfriamento de um feixe supersônico de moléculas de Rb2 e o aprisionamento destas moléculas. Apresentamos também simulações para otimizar o processo de bombeamento ótico das moléculas do feixe para o estado fundamental. Os resultados dessas simulações preveem a melhor configuração das fontes de luz laser que precisamos para maximizar o processo de bombeamento ótico das moléculas Rb2.

Palavras-chave: Moléculas frias. Feixe supersônico. Desaceleração de moléculas.

Referências:

1 CHU, S. *et al.* Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure. **Physical Review Letters**, v. 55, n. 1, p. 48-51, July 1985.
2 HUDSON, E. R. *et al.* Cold molecule spectroscopy for constraining the evolution of the fine structure constant. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 14, p. 143004-1-143004-4, Apr. 2006.

PG48

Estrutura molecular que incorpora scaffolds de quinazolina e chalcona para o desenvolvimento de híbridos anticâncer

SOUZA, M. S.[1]; MASS, E. B.[2]; RUSSOWSKY, D.[3]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

msouza@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Quimica - UFRGS

[3]Instituto de Quimica - UFRGS

Durante o século XX, após o fim da Primeira Guerra Mundial, com os avanços em pesquisas no campo da radioterapia e com o surgimento das primeiras ligas contra o câncer, a doença passou por um enquadramento, indo de enfermidade individual vinculada à urbanização e à industrialização para um problema de saúde pública relacionado às dificuldades de acesso e funcionamento dos serviços de saúde.(1) No Brasil, o processo o transformou em uma presença marcante no cotidiano e em vigorosa preocupação social. Recente reporte da Agência Internacional para Pesquisa em Câncer apresenta uma previsão de que até o ano de 2040 estarão notificados 29,5 milhões de casos de câncer no mundo, com um acúmulo de 16,4 milhões de mortes. Os quatro cânceres sólidos mais prevalentes são os que apresentam tumor maligno no pulmão, mama feminina, intestino e próstata.(2) A progressão metastática é um processo complexo e clinicamente difícil, com migração, invasão e angiogênese sendo as principais características. A invasão de células ao tecido circundante é comum na evolução tumoral e um passo inicial para a metástase. Este fenômeno requer o início da migração celular, a qual envolve a modulação da tubulina. No processo de invasão celular, as células migram para o compartimento estromal, onde têm livre acesso aos vasos sanguíneos e linfáticos. Ao penetrar nas paredes dos vasos estas células são carregadas pelo sistema circulatório para locais distantes.(3) Neste trabalho de doutorado estamos desenvolvendo candidatos à agentes antitumorais e antimetastáticos por meio da integração de métodos *in silico* e *in vitro* em Química Medicinal. O planejamento de novos compostos tem como pilar uma série sintética híbrida de quinazolina-chalconas. 10 compostos foram investigados por meio de ensaios celulares para a identificação de moléculas citotóxicas *in vitro*. Para isto, linhagens de câncer de mama (MDA-MB-231), de fibroblastos murinos saudáveis (FC3H) e de fibroblastos humanos saudáveis (HFF-1) foram avaliadas quanto à potência a partir da determinação dos seus valores de IC50, bem como a capacidade de inviabilizar seletivamente as células tumorais. Foram identificados 8 *hits* com valores de IC50 $\leq$ 20 μM em MDA. Destes, 3 compostos se mostraram seletivamente citotóxicos (IS $>$ 3) frente ambos os fibroblastos, sendo eles: AQC-02 (**a**); AQC-06 (**b**) e AQC-10 (**c**). A caracterização da atividade contra um fenótipo também foi avaliada para os compostos triados, os quais inibiram a migração celular em ensaios qualitativos *wound healing* concentração única e dose-resposta. Os resultados apontaram para o envolvimento das moléculas na interrupção de processos relacionados às condições patológicas e o quão promissores são para avançar para os ensaios cinéticos direcionados ao alvo macromolecular. Antes disto, estudos quantitativos em câmara de Boyden revelaram que os compostos **a**-**c** apresentaram IC50 migração celular de 2,78 $\pm$ 0,23; 1,26 $\pm$ 0,10 e 4,28 $\pm$ 0,25 μM e IC50 invasão celular de 2,66 $\pm$ 0,35; 1,28 $\pm$ 0,22 e 4,36 $\pm$ 0,41 μM, respectivamente. Desta forma, este trabalho vem acumulando dados importantes que corroboram as decisões tomadas na triagem de candidatos a fármacos visando o tratamento do câncer de mama triplo-negativo e metastático.

Palavras-chave: Câncer de mama. Ensaios celulares. Migração e invasão celular.

Referências:

1 TEIXEIRA, L. A.O; FONSECA, C. O. Sobre a história social do câncer. *In*: TEIXEIRA, L. A. O.; FONSECA, C. O. **De doença desconhecida a problema de saúde pública**: o INCA e o controle do câncer no Brasil. Rio de Janeiro: Ministério da Saúde, 2007. p. 13-24. 2 ICGC/TCGA PAN-CANCER ANALYSIS OF WHOLE GENOMES CONSORTIUM. Pan-cancer analysis of whole genomes. **Nature**, v. 578, n. 7793, p. 82-93, 2020. 3 FRIEDL, P. R.; ALEXANDER, S. Cancer invasion and the microenvironment: plasticity and reciprocity. **Cell**, v. 147, n. 5, p. 992-1009, 2011.

187

PG49

Desenvolvimento do método de espectroscopia por volume único Stimulated Echo Acquisition Mode (STEAM) compatível com o espectrômetro digital do CIERMag

MARCOLAN, J.[1]; TANNÚS, A.[1]

juliamarcolan@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) descreve as propriedades magnéticas de núcleos que, na presença de um campo magnético externo, tendem a se alinhar com ele. O alinhamento ocorre devido a ação do campo sobre o momento magnético do núcleo produzindo um torque. A existência de um momentum angular intrinsecamente associado a um momento magnético faz com que se inicie um movimento de precessão que ocorre em uma frequência conhecida como frequência de Larmor. Se um pulso de radiofrequência for aplicado ao sistema em uma direção diferente deste campo, os núcleos serão removidos da situação de equilíbrio e ao retornarem emitem um sinal de radiofrequência. (1) Técnicas que utilizam RMN, como relaxometria, espectroscopia e imagem por ressonância magnética, são poderosas pois permitem investigar desde a estrutura molecular até traçar um perfil bioquímico de diversos tecidos, ajudando, por exemplo, na identificação de doenças como tumores. Além da vasta aplicabilidade, RMN é uma técnica não invasiva. Contudo, os equipamentos comerciais existentes, além de muito caros, não fornecem ferramentas que facilitem o desenvolvimento de novos Métodos de RMN. Para contornar esse problema, o Centro de Imagens e espectroscopia por Ressonância Magnética (CIERMag) desenvolveu um Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS), do qual um dos protótipos encontra-se em testes através de uma parceria com o *Center for Magnetic Resonance Research* (CMRR) da Universidade de Minnesota. Também foi produzida pelo CIERMag a estrutura necessária para o desenvolvimento de novos métodos que incluem um *Integrated Development Environment* (IDE) baseado no *Python Magnetic Resonance Framework* (PyMR), uma interface de prescrição gráfica e a linguagem primitiva "F", que conta com um compilador e um editor sensível à linguagem. A linguagem "F" foi idealizada para o desenvolvimento de métodos RMN e por isso é capaz de representar as sequências de forma clara e intuitiva. Esta linguagem é composta por fragmentos de código que podem ser reutilizados, além de permitir que o usuário final tenha controle sobre elementos do hardware do DMRS. Para ajudar na tradução dos métodos de RMN para a linguagem "F" foram desenvolvidas, utilizando o Microsoft Visio, *stencils* contendo representações gráficas de todos os eventos relacionados ao funcionamento do DMRS. Esses *stencils* foram utilizados para ilustrar a *Stimulated Echo Acquisition Mode* (STEAM), um método de espectroscopia de volume localizado capaz de cobrir um volume tridimensional com apenas uma varredura, além de permitir que tempos de eco muito curtos sejam utilizados. (2) A STEAM conta com a aplicação de três pulsos de radiofrequência de 90° ao longo dos eixos ortogonais para selecionar o sinal proveniente da região onde os eixos se interceptam. Com a ajuda do esquema, a STEAM foi traduzida para uma sequência compilável em linguagem "F". No momento, busca-se escrever a sequência STEAM em linguagem "F" compatível com um hardware *Multi-Coil Array* (MCA), cuja abordagem consiste na substituição de convencionais campos com gradientes ortogonais por um conjunto de bobinas localizadas individuais percorridas por uma corrente elétrica, que prometem reduzir a complexidade de hardware de RMN. (3)

Palavras-chave: Ressonância Magnética Nuclear. Espectroscopia de volume único. STEAM.

Referências:

1 BROWN, R. W. *et al*. **Magnetic resonance imaging**: physical principles and sequence design. 2nd ed. New York: Wiley, 2014.
2 DE GRAAF, R. A. **In vivo NMR spectroscopy**: principles and techniques. 3rd ed. New York: Wiley, 2019.
3 JUCHEM, C. *et al*. Magnetic field modeling with a set of individual localized coils. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 204, n. 2, p. 281-289, 2010.

189

PG50

Análise das interações entre septinas envolvidas no core de octâmeros e hexâmeros.

SIQUEIRA NETO, N. S.[1]; ARAÚJO, A. P. U.[1]

nssiqueira.neto@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas que se ligam aos nucleotídeos de guanina, muitas sendo capazes de hidrolisá-lo, sendo conservadas em todos os metazoários e fungos. São consideradas proteínas citoesqueléticas, participando de diversas funções celulares como a citocinese, exocitose, fagocitose, tráfego de vesículas, entre outras. (1) Uma importante característica das septinas reside na sua capacidade de polimerização, iniciada com a formação de complexos heteroligoméricos. Destes complexos, o melhor já caracterizado é um hexâmero, formado pelas septinas humanas SEPT2, SEPT6 e SEPT7, numa ordem 2-6-7-7-6-2. (2) Estudos já demonstraram que, nas células, esse complexo pode conter também duas moléculas de outra septina, a SEPT9, constituindo assim um octâmero como unidade estrutural. Ambos, hexâmeros e octâmeros, podem polimerizar-se via suas extremidades para formar filamentos, sendo capazes assim de organizar estruturas mais complexas. (3) Estudos recentes mostraram que, num mesmo filamento, é possível encontrar uma mistura de octâmeros e hexâmeros, mas como isso ocorre ainda não está estabelecido. Neste contexto, sabendo que SEPT9 situa-se no centro de octâmeros (2-6-7-9-9-7-6-2), há duas hipóteses aceitáveis para gerar essa mistura: SEPT9 pode ser adicionada a hexâmeros pré-existentes para formar o octâmero, o que implicaria no rompimento da interação prévia de SEPT7-SEPT7. Alternativamente, SEPT9 estabeleceria primeiramente um complexo heterodimérico com SEPT7, que a seguir se juntaria ao complexo 2-6. Em última análise, a forma utilizada para SEPT9 integrar o octâmero determinará se hexâmeros pré-formados poderão tornar-se octâmeros ou não. Assim, neste projeto, técnicas biofísicas como a termoforese (MST) e a microcalorimetria (ITC) serão utilizadas para avaliar de forma comparativa a força da interação SEPT7-SEPT7 e SEPT7-SEPT9, visando identificar determinantes moleculares que contribuem para a montagem dos octâmeros.

Palavras-chave: Biofísica. Septinas. Octâmeros.

Referências:

1 NISHIHAMA, R.; ONISHI, M.; PRINGLE, J. R. New insights into the phylogenetic distribution and evolutionary origins of the septins. **Biological Chemistry**, v. 392, n. 8-9, p. 681-687, 2011. DOI 10.1515/BC.2011.086.

2 SIRAJUDDIN, M. *et al.* Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007. DOI 10.1038/nature06052.

3 SORROR, F. *et al.* Revised subunit order of mammalian septin complexes explains their in vitro polymerization properties. **Molecular Biology of the Cell**, v. 32, n. 3, p. 211-310, 2021. DOI 10.1091/mbc.E20-06-0398.

190

PG51

Dinâmica de fluidos computacional através de imagens por ressonância magnética: processamento de imagens e reconstrução tridimensional

SOLCIA, G.[1]; FOERSTER, B. U.[1]; ANDREETA, M.[1]; BONAGAMBA, T. J.[1]; PAIVA, F. F.[1]

gustavo.solcia@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) se beneficiou do aumento do desempenho dos computadores nos ultimos anos para simulações industriais. Recentemente, as aplicações da DFC tem se diversificado para áreas que dependem de técnicas como as Imagens por Ressonância Magnética (IRM). Entretanto, para combinar IRM com DFC, o processamento de imagens e a reconstrução tridimensional são etapas essenciais que garantem a viabilidade e qualidade das simulações. O propósito deste trabalho é de analisar e discutir os algoritmos utilizados nesse processo.Utilizamos a base de dados de cérebros simulados chamada BrainWeb (1) para avaliar o algoritmo de redução de ruído non-local means. (2) Fizemos uma modificação no algoritmo para sua utilização no padrão de ruído Riciano, típico em IRM. Nas demais etapas de correção de bias field (N4ITK), segmentação (Atropos), reconstrução 3D (*Marching Cubes*) e suavização (*Taubin Filter*) utilizamos imagens de rochas carbonáticas adquiridas no CIERMag. Além disso, foram feitos ajustes geométricos com o software Blender. As simulações de DFC foram realizadas através do software OpenFOAM (3) e testaram a viabilidade dos modelos reconstruidos. Com o algoritmo non-local means adaptado para ruído Riciano atingimos uma melhora nas imagens da base de dados BrainWeb com um ganho médio de 6.8 e 17.8%, respectivamente nas métricas PSNR e SSIM. Encontramos que a segmentação através do Atropos é otimizada utilisando três labels para uma melhor identificação das estruturas. Entretanto, garantir uma maior uniformidade e discretização na região de contorno dos sólidos através do Blender foi uma etapa essencial para a convergência da DFC. Neste estudo, fizemos alterações para adequar um algoritmo de redução de ruído para IRM e analisamos etapas essenciais no fluxo de trabalho para a convergência de simulações em DFC. Evitar faces oblíquas na construção da malha volumétrica se mostrou a principal razão para utilizar além de ajustes geométricos com o software Blender, realizar correção de bias field, segmentação e suavização. Em estudos futuros pretendemos diminuir o tempo de processamento do filtro non-local means através de paralelização e validar as curvas de vazão provenientes da DFC com experimentos.

Palavras-chave: Dinâmica de fluidos computacional. Imagens por ressonância magnética. Processamento de imagens.

Referências:

1 COLLINS, D. L. *et al.* Design and construction of a realistic digital brain phantom. **IEEE Transactions on Medical Imaging** , v. 17, n. 3, p. 463-468, June 1998.

2 BUADES, A.; COLL, B.. MOREL, J.-M. A non-local algorithm for image denoising. *In*: IEEE COMPUTER SOCIETY CONFERENCE ON COMPUTER VISION AND PATTERN RECOGNITION, 2005, San Diego, CA. **Proceedings [...]**. Washington, DC: IEEE Computer Society, 2005. v. 2, p. 60-65.

3 WELLER, H. G. *et al.* A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-

oriented techniques. **Computers in Physics**, v. 12, n. 6, p. 620-631, Nov./Dec. 1998.

192

PG52

Diversidade de opiniões e bolhas sociais no modelo de Sznajd adaptado

BENATTI, A.
alexandre.benatti@usp.br

Entender a maneira pela qual a opinião humana muda ao longo do tempo e do espaço constitui um dos gran-des 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 particular-mente 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 permi-tindo 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 iversidade foi calculada como a exponencial da en-tropia da densidade de opiniões. Neste trabalho foi abordado a capacidade da dinâmica em simular bolhas sociais, mostrando que a diversida-de 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)

Palavras-chave: Modelos baseados em agentes. Processos dinâmicos. Dinâmica de rede.

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. **Peer Journal of Computer Science**, v. 1, p. e38, 2015.

193

PG53

Avaliação do efeito da terapia fotodinâmica em osteorradionecrose induzida em modelo animal

MARQUES, M. J. A. M.[1]; KURACHI, C.[1]

maria.julia.marques@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A osteorradionecrose (ORN) é um dos efeitos colaterais mais graves da Radioterapia, que é um dos tratamentos utilizados para as neoplasias de cabeça e pescoço. A ORN é uma doença na qual o osso irradiado torna-se desvitalizado e exposto através da perda da integridade da pele e da mucosa, persistindo sem cicatrização. (1) Esse quadro leva a constantes infecções causadas por patógenos da microbiota natural e pelo estado de imunossupressão frequente nos pacientes em tratamento oncológico. Atualmente não há cura para ORN, há apenas controle clínico, uma vez que o dano causado pela RT de cabeça e pescoço não é reversível na mandíbula. O tratamento da ORN depende de sua extensão, baseando-se em uma combinação de medidas conservadoras, sendo que a mais utilizada é a antibioticoterapia tópica ou sistêmica, e ressecção cirúrgica, sendo que aproximadamente metade dos pacientes que apresentam ORN necessita dela. As atuais estratégias para a prevenção da ORN são: uso de creme dental com alto teor de flúor, oxigênio hiperbárico, plasma rico em plaquetas e profilaxia antibiótica, que apresentam resultados limitados. (2) Entretanto, estão sendo utilizadas modalidades terapêuticas alternativas, como fotobiomodulação e terapia fotodinâmica antimicrobiana como tratamento, no entanto, estudos in vivo ainda são escassos e o conhecimento dos mecanismos associados na combinação das técnicas e protocolo eficiente ainda não estão completamente definidos. A Terapia Fotodinâmica antimicrobiana (TFDa) baseia-se no mecanismo onde a luz interage com um fotossensibilizador (FS), e por conta da absorção de luz, o FS inicia uma série de reações químicas que levam a produção direta ou indireta de oxigênio singleto e outras espécies reativas de oxigênio, que são produtos que causam danos a microrganismos. A fotobiomodulação atua para induzir a angiogênese e a cicatrização tecidual. O objetivo deste projeto é avaliar a eficácia da Terapia Fotodinâmica antimicrobiana e a fotobiomodulação como tratamento para osteorradionecrose em modelo animal, através da análise da redução microbiana e da cicatrização tecidual da lesão óssea. No modelo in vivo serão utilizados os ratos Wistar da linhagem albina da espécie Rattus norvegicus, a lesão de ORN será induzida por braquiterapia de alta taxa de dose e serão tratadas com TFDa. A lesão óssea será infectada localmente por S aureus. A TFDa será aplicada testando como fotossensibilizador o azul de metileno e um derivado de clorina e6. A fotobiomodulação será realizada empregando um laser de 660 nm e após a TFDa, em sessões diárias até duas semanas. O efeito do tratamento combinado no modelo de ORN será avaliado através de imagens radiográficas, análise da redução microbiana e análises clínica e histológica da resposta ao tratamento observada na lesão.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Osteorradionecrose.

Referências:

1 ALDUNATE, J. L. C. B. *et al.* Osteoradionecrosis in face: pathophysiology, diagnosis and treatment. **Revista Brasileira de Cirurgia Plástica**, v. 25, n. 2, p. 381-387, 2010.

2 EL-RABBANY, M. *et al.* Interventions for preventing osteoradionecrosis of the jaws in adults receiving head and neck radiotherapy. **Cochrane Database of Systematic Reviews**, v. 2019, n. 11, p. CD011559-1-CD011559-29, 2019. DOI: https://doi.org/10.1002/14651858.CD011559.pub2.

PG54

Implementação de um sistema sintonizável para o estudo da dependência espectral da primeira hiperpolarizabilidade molecular

SANTOS, C. H.[1]; BONI, L.[1]

c.henrique@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Após a invenção de pulsos laser ultracurtos que geram intensidades na ordem de GW/cm2, experimentos para o estudo das não linearidades ópticas dos materiais se tornaram possíveis. Uma delas é a primeira hiperpolarizabilidade molecular β, que é o análogo microscópico da susceptibilidade óptica de segunda ordem 2. Este é um efeito óptico paramétrico, no qual, pelo ponto de vista da mecânica quântica, dois fotóns de mesma frequência 1 são aniquilados e é criado um fóton espalhado com o dobro da frequência 21. O conhecimento do comportamento espectral de β é essencial para a compreensão e previsão das relações entre estrutura e propriedades ópticas de materiais (1) para o desenvolvimento de várias aplicações, como por exemplo, dispositivos eletro-ópticos, amplificador paramétrico óptico e biomarcadores, contudo, na literatura encontra-se em sua grande maioria, valores experimentais de β para apenas um comprimento de onda, geralmente em 1064 nm. (2) A técnica HRS (*Hyper Raileigh Scattering*) proposta em 1991 por Clays e Persoons (3) tornou-se uma técnica padrão para medir β, devido a sua relativa simplicidade com o aparato experimental e capacidade de obter o resultado de forma rápida, direta e precisa. Em linhas gerais, é realizado o monitoramento da intensidade de luz espalhada I(2) em função da intensidade de luz incidente I(), de modo que, quando este é realizado para várias concentrações do soluto, é possível calcular o valor da primeira hipolarizabilidade. Logo, neste trabalho está sendo desenvolvido um sistema experimental de espalhamento hyper-Rayleigh utilizando um amplificador paramétrico operando no regime temporal de femtossegundos e com comprimento de onda sintonizável na faixa de 400 nm até 14 µm. Após esta fase, será possível estudar o comportamento espectral da hiperpolarizabilidade de primeira ordem para várias moléculas orgânicas de forma inédita.

Palavras-chave: *Hyper Rayleigh scattering*. Hiperpolarizabilidade molecular. Moléculas orgânicas.

Referências:

1 PIELAK, K. *et al*. Second-order nonlinear optical properties of multiaddressable indolinooxazolidine derivatives: joint computational and hyper-Rayleigh scattering investigations. **Journal of Physical Chemistry C**, v, 121, n. 3, p. 1851-1860, 2017.
2 CAMPO, J. *et al*., Highly sensitive setup for tunable wavelength hyper-Rayleigh scattering with parallel detection and calibration data for various solvents. **Optics Express**, v. 17, n. 6, p. 4587-4604, 2009.
3 CLAYS, K.; PERSOONS, A. Hyper[U+2010]Rayleigh scattering in solution. **Review of Scientific Instruments**, v. 63, n. 6, p. 3285-3289, 1992.

PG55

A dependência temporal da descoerência de um qubit por ruído de fase: cálculos analíticos das soluções exata e da equação mestra

MOTTA, O.[1]; NAPOLITANO, R. J.[1]

octavio.motta@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Abordaremos o ruído de fase através do modelo de spin e bóson (1), com uma densidade espectral do banho bosônico ôhmica. (2) O cálculo da descoerência de um qubit de memória será feito analiticamente para obtermos a solução exata do sistema global, incluindo o qubit e o banho, através da resolução da equação de Schrödinger para a hamiltoniana do modelo. Também será feito o cálculo analítico da solução da equação mestra não markoviana, que é uma equação íntegro-diferencial. Por cálculos preliminares de nossa equipe já sabemos que estas respostas são idênticas, embora não sabemos a razão, já que a equação mestra é uma aproximação de segunda ordem nas constantes de acoplamento. O objetivo deste mestrado tem duas partes. A primeira é encontrar a resposta para a razão da coincidência entre a solução exata e a da equação mestra para a descoerência como função do tempo do qubit. A segunda parte consiste em entender se é ou não possível obter a proteção contra o ruído para um qubit de memória, dentro do contexto do procedimento de desacoplamento dinâmico contínuo, muito estudado em nosso grupo, mas no limite em que o ruído se torna markoviano.

Palavras-chave: Informação quântica. Descoerência. Qubit.

Referências:

1 CALDEIRA, A. O.; LEGGETT, A. J. Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems. **Physical Review Letters**, v. 46, n. 4, p. 211-214, 1981.
2 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**. 10th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.

196

PG56

Abordagem NRG para o cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica.

DINIZ, G.[1]; OLIVEIRA, L. N.[1]

gustavodiniz0310@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Fenômenos de adsorção de partículas atômicas, como corrosão e catálise, por exemplo, podem ser entendidos a partir do processo de colisão entre um átomo ou molécula e uma superfície. Qualitativamente o problema pode ser descrito por uma partícula, inicialmente neutra, se aproximando da superfície metálica. A superposição entre os orbitais da partícula e os dos átomos na superfície cresce, e possibilita transferência de carga. Quando um elétron é transferido, a partícula passa a ter carga elétrica, e consequentemente aparece um potencial de carga imagem, o que acelera a partícula em direção à superfície. Na colisão subsequente a geração de fônons e de pares elétron-buraco no metal rouba energia da partícula incidente, que pode ficar presa no potencial atrativo. Existe, portanto, uma probabilidade de que essa partícula seja adsorvida pela superfície. O desafio teórico é calcular essa probabilidade, que recebe o nome de coeficiente de adsorção S. O cálculo da contribuição dos pares para S, em função da energia cinética inicial, é uma questão ainda aberta e constituirá o foco deste trabalho. Em trabalhos anteriores, foi mostrado que a aproximação de Born-Oppenheimer, tradicionalmente empregada, é pouco confiável, e que um cálculo completo empregando tratamento numérico preciso da função de onda dependente do tempo é necessário. (1) Esse trabalho, entretanto, tem precisão limitada porque recorreu a uma aproximação de campo médio para descrever a interação entre o átomo e os elétrons da banda. Queremos aqui aperfeiçoar o cálculo, Para isso, substituiremos a aproximação de campo médio por meio do método do grupo de renormalização numérico (NRG), que produz resultados essencialmente exatos. (2) A modelagem pode ser simplificada pela incidência normal de um átomo de hidrogênio, inicialmente neutro, sobre a superfície de um metal, que será descrito por uma banda sem estrutura. Para descrever esse sistema, empregaremos o modelo de Anderson de uma impureza, $H = \sum_\sigma\varepsilon_dc_d^\dagger c_d + Un_d\uparrow n_d\downarrow + \sum_k\varepsilon_kc_k^\dagger c_k + V(z)(f_0^\dagger c_d + c_d^\dagger f_0) + \frac{P_z^2}{2M} + W(z)(n_d - 1)^2 f_0^\dagger f_0$. Os quatro primeiros termos são os tradicionais termos do modelo de Anderson (c_d denota o orbital atômico, $f_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_kc_k$ e N é o número de estados c_k da banda de condução). O penúltimo termo é a energia cinética do núcleo e o último termo é o potencial da carga imagem. O procedimento numérico baseia-se em encontrar o espectro de energias eletrônicas, utilizando NRG, para cada valor da coordenada $z = z_m$. No estado inicial, a partícula está longe da superfície, e sua função de onda é o produto entre o estado fundamental eletrônico e uma gaussiana centrada numa posição inicial, a qual descreve a parte nuclear. O procedimento de Crank-Nicolson (3) permite calcular a evolução temporal da função de onda, até que, depois da colisão, a função se divida em uma parte localizada perto da superfície e outra que se afasta dela. A integral espacial do módulo quadrado da primeira parte determina o coeficiente de adesão S. Todos os cálculos analíticos para auxiliar na solução desse problema já foram realizados, e atualmente o foco concentra-se em finalizar o código do NRG. Com esse código em mãos, poderemos aplicar o procedimento descrito acima para obter o coeficiente S.

Palavras-chave: Coeficiente de adsorção. Grupo de renormalização numérico.

Referências:

1 REGO, C. R.; REQUIST , R.; GROSS, E. K. U.; OLIVEIRA, L. N. **Sticking coefficient for atoms scattering off metallic surfaces**. 2021. (em fase de elaboração).
2 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 80, n. 2, p. 395-450, 2008.
3 CRANK, J.; NICOLSON, P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 43, n. 1, 50-67, 1947.

198

PG57

Terapia fotodinâmica antimicrobiana no tratamento da pneumonia

KASSAB, G.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; TOVAR, J. S. D.[1]; BRAZACA, L.[2]; FEITOR, J. F.[3]; REIS, F. P.[4]; GOMES, S.[5]; BUZZÁ, H. H.[1]; INADA, N. M.[1]; FERNANDES, P. M. P.[4]; CARDOSO, D. R.[3]; CARRILHO, E.[3]; KURACHI, C.[1]

giulia.kassab@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]USP

[3]Instituto de Química de São Carlos - USP

[4]InCor-USP

[5]FM-USP

Infecções do trato respiratório inferior são a principal causa de morte infecciosa no mundo. Diante da incidência cada vez mais frequente de resistência a antibióticos, e também do surgimento de novos patógenos, se faz necessário o desenvolvimento de um tratamento para pneumonias que seja não só eficaz e seguro, mas também pluripotente. A terapia fotodinâmica antimicrobiana (TFDa) se apresenta como uma excelente opção, já que é capaz de eliminar vírus e bactérias de forma segura e sem selecionar resistência. Estudos anteriores já demonstraram a eficácia e segurança da combinação entre o fotossensibilizador indocianina verde (ICV) e a luz infravermelha na eliminação de bactérias causadoras de pneumonia *in vitro* e em modelo animal.(1–3) No entanto, encontraram-se grande dificuldades em se obter resultados de eficácia em modelo murino, o que levou ao desenvolvimento de uma plataforma de pulmão-em-um-chip, e ensaios em modelo porcino. Na montagem do pulmão-em-um-chip, optou-se pela combinação de componentes que se mostrou mais barata, e passível de reutilização. Já no experimento piloto em modelo porcino, foi possível demonstrar a penetração da luz através da cavidade torácica, um resultado de grande valor para o projeto. Mas infelizmente, também não houve eficácia do tratamento neste modelo. Isso levou à hipótese de que a ICV estivesse interagindo com algum componente do microambiente alveolar, que foi investigada mais a fundo. Foi demonstrada a inibição da TFDa na presença do surfactante pulmonar, o que explica a dificuldade em translacionar os resultados promissores *in vitro* para modelos *in vivo*. Os mecanismos por trás desta interação estão sob investigação no momento, mas é possível que este fotossensibilizador não seja adequado para o tratamento de infecções pulmonares. Dessa forma, outras alternativas também estão em estudo.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica antimicrobiana. Pneumonia. Indocianina verde. Orgãos-em-chip. Surfactante pulmonar.

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, 2018. DOI: 10.1002/jbio.201600283. 2 GERALDE, M. C. *et al.* Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumination: an experimental model. **Physiological Reports**; v. 5, n. 5, p. e13190, 2017. 3 KASSAB, G.

et al. Safety and delivery efficiency of a photodynamic treatment of the lungs using indocyanine green and extracorporeal near infrared illumination. **Journal of Biophotonics**, v. 13, n. 10, p. e202000176, 2020.

200

PG58
Energetics of autonomous quantum systems

MALAVAZI, A. H. A.[1]; BRITO, F. B.[1]
andrehamalavazi@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Quantum thermodynamics (QT) is the research field concerned both with the extension of thermodynamics to small non-equilibrium quantum systems (top-down) and the emergence of these macroscopic laws from underlying quantum dynamical ones (bottom-up). Historicaly, QT is the most natural result of recent successful efforts to expand the applicability range of thermodynamics and, despite its youth, is already a very promising and fruitful field for both theoretical and practical purposes. Its importance becomes obvious when technological progress enable us to design and develop devices capable to function in scenarios where quantum effects are relevant and – potentially – necessary to their operation. In this sense, a thermodynamic description of such genuine quantum technologies is imperative in order to properly understand and fabricate them. However, even though the constant growing community, efforts and published papers on the field, there are several subtle and basic questions to be addressed. In particular, despite different proposals (1-3), it still not clear how to properly define and establish coherent quantum version of classical thermodynamic concepts and quantities, such as work, heat and even internal energy. Such critical gap intensifies when one deals with open quantum systems beyond the usual approximated regimes and orthodoxal thermodynamic setups, especially in contexts where strong-coupling and correlations are extremely important to the local dynamical descriptions. Here, we are interested to address such fundamental questions, in particular we are concerned on the energetics of generic quantum systems. In order to do that we propose and introduce a new general framework applicable to the thermodynamic analysis of arbitrary autonomous dynamics.

Palavras-chave: Quantum mechanics. Quantum thermodynamics. Open quantum systems

Referências:

1 ALICKI, R. The quantum open system as a model of the heat engine. **Journal of Physics A**: mathematical and general, v.12, n.5, p.L103,1979. 2 PERARNAU-LLOBET, M. *et al*. No-Go yheorem for the characterization of work fluctuations in coherent quantum systems. **Physical Review Letters**, v.118, n.7, p.1–6,2017. DOI 10.1103/PhysRevLett.118.070601.
3 ALIPOUR, S. *et al*. **Unambiguous formulation for heat and work in arbitrary** .Disponivel em: http://arxiv.org/abs/1912.01939. Acesso em: 15 junho 2021.

201

PG59
Passeio quântico de elefante

NAVES, C. B.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]
caio.naves@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Motivados pelo grande sucesso da aplicação dos passeios aleatórios clássicos no desenvolvimento de algoritmos e na simulação de processos físicos, os passeios quânticos (1) se mostraram tão poderosos quanto a sua contrapartida clássica no desenvolvimento de algoritmos quânticos, como por exemplo a Busca de Grover. Além disso, tanto a sua versão discreta quanto a contínua, se mostraram universais para a computação quântica e, mais recentemente, essa universalidade foi estendida para incorporar a simulação de sistemas quânticos abertos. Diversos estudos sobre efeitos de ruídos na evolução de passeios quânticos foram realizados, como a introdução de parâmetros aleatórios na evolução unitária e a sua evolução aberta. Nesse contexto, o passeio quântico de elefante (2) trata-se de um passeio quântico de tempo discreto onde o tamanho do passo dado pelo caminhante em um dado instante de tempo é determinado de acordo com uma distribuição de probabilidades, denominada memória. Desse modo, a cada instante de tempo temos um operador unitário aleatório. (3) Como foi mostrado em (2), tal passeio possui um coeficiente de difusão hiperbalístico, em contraste com o coeficiente de difusão balístico do passeio quântico de tempo discreto padrão. Outra característica que contrasta com o passeio padrão é o alto grau de produção de emaranhamento entre a moeda e as posições na rede, onde demonstramos numericamente que para uma ampla gama de parâmetros iniciais e de evolução a produção é máxima. Também realizamos uma análise do grau de não-markovianidade do passeio quântico de elefante através da distância-traço, onde constatamos uma maior permanência da evolução não-markoviana. As perspectivas do presente trabalho são de realizar a extensão do passeio de elefante unidimensional para o caso bidimensional e analisar os efeitos da introdução de correlações entre os parâmetros da evolução nas diferentes direções.

Palavras-chave: Passeios quânticos.

Referências:

1 REITZNER, D.; NAGAJ, D.; BUŽEK, V. Quantum walks. **Acta Physica Slovaca**, v. 61, n. 6, p. 603-725, Dec. 2011.
2 MOLFETTA, G. D.; SOARES PINTO, D. O.; QUEIRÓS, S. M. D. Elephant quantum walk. **Physical Review A**, v. 97, n. 6, p. 062112-1-062112-6, June 2018.
3 PIRES, M. A.; MOLFETTA, G. D.; QUEIRÓS, S. M. D. Multiple transitions between normal and hyperballistic diffusion in quantum walks with time-dependent jumps. **Scientific Reports**, v. 9, n. 1, p. 19292-1-19292-8, July 2019.

202

PG60

Descoberta de derivados de marinoquinolina como inibidores de Plasmodium falciparum

SOUZA, G.[1]; AGUIAR, A. C. C.; GUIDO, R. V. C.[1]; BARBOSA, C. S.

guilherme.eduardo.souza@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A malária é a doença tropical com maior taxa de mortalidade global. O surgimento de resistência às terapias de primeira linha reforça a necessidade de descoberta e desenvolvimento de novos candidatos a fármacos. O objetivo deste trabalho foi a descoberta de novos derivados marinoquinolínicos como inibidores do desenvolvimento da forma assexuada de *Plasmodium falciparum*, bem como o estudo do mecanismo pelo qual as marinoquinolinas exercem seu efeito antiplasmodial.(1) Nesse sentido, potentes derivados marinoquinolínicos já identificados nesta série, como a **MQ-196** (IC_50^{3D7} = 100 nM) e a **MQAA22** (IC_50^{3D7} = 500 nM), foram avaliados em diferentes estudos visando elucidar o mecanismo de ação desta série química. A avaliação da **MQAA22** frente a um painel de cepas resistentes mostrou que marinoquinolinas não apresentam resistência cruzada com antimaláricos-padrão como cloroquina, pirimetamina e atovaquona, o que sugere que marinoquinolinas possuem um mecanismo de ação diferente do mecanismo destes antimaláricos. O composto **MQ-196** foi avaliado no ensaio de resgate químico, (2) que indicou que marinoquinolinas não inibem a síntese de precursores de isoprenoides. Por outro lado, ensaios celulares sugeriram que o composto **MQAA22** foi capaz de perturbar a homeostase do vacúolo digestivo, organela essencial ao metabolismo do *Plasmodium*, possivelmente através da inibição de proteases do parasita. Em paralelo, esforços estão sendo aplicados na obtenção de uma cepa de *Plasmodium falciparum* resistente à ação das marinoquinolinas, cujo sequenciamento genético poderá indicar o alvo molecular responsável pela atividade antiplasmodial desta série química.

Palavras-chave: Malária. Marinoquinolinas. Desenvolvimento de fármaco.

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 Medicine Chemistry**, v. 61, n. 13, p. 5547–5568, 2018.
2 YEH, E. *et al*. Chemical rescue of malaria parasites lacking an apicoplast defines organelle function in blood-stage plasmodium falciparum. **PLoS Biology**, v. 9, n. 8, p. e1001138, 2011.

203

PG61

Estudos biofísicos e estruturais das septinas de Drosophila melanogaster

FERNANDES, A.[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]; GARRATT, R.[1]

adriano.fernandes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

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 encontram-se 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 Sep1, Sep2, Sep4, Sep5 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) Neste estudo foram investigados parâmetros biofísicos destas septinas em solução, bem como avaliada a formação de complexos. Além disto, foram realizadas modelagens computacionais por homologia, dinâmica molecular e experimentos de Adaptive Steered Molecular Dynamics (SMD) a fim de investigar os aminoácidos fundamentais para a formação de complexos. 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.

Palavras-chave: Septinas. *Drosophila melanogaster*. Modelagem molecular.

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.

PG62

Sondando matéria escura no sistema solar através de raios gama

FAGIANI, J.[1]; SIQUEIRA, C.[1]; SOUZA, V.[1]

juan.fagiani@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, é amplamente aceito que a densidade de matéria do Universo consiste principalmente de uma componente desconhecida, denominada matéria escura (ME). A qual acredita-se ser composta por uma nova partícula elementar estável, fria, neutra e não bariônica. Nas últimas décadas, houve uma intensa busca por essas partículas, especialmente os principais candidatos, como as *Weakly interacting massive particles* (WIMPs). Entretanto, não ocorreu nenhuma detecção confirmada, impondo fortes restrições a esses candidatos, especialmente por experimentos de detecção direta e colisores. Este cenário, motiva a busca por novos modelos e novas formas de procurar pela ME. (1) Esse projeto visa abordar justamente esse aspecto, no qual estuda-se cenários modificados das WIMPs, especificamente, "mediadores de vida longa" (*long-lived mediators*), que abrem novas janelas de busca pela matéria escura. Particularmente, esses candidatos tornam viável a observação de raios gama advindos da possível auto-aniquilação de matéria escura no núcleo de corpos celestes, como o Sol e planetas, sendo esse um canal de detecção pouco explorado e com um forte potencial de detecção. (2) Mais especificamente, esse projeto pretende estimar a sensitividade de novos observatórios de raios gama como o *The Southern Wide-field Gamma-ray Observatory* (SWGO) e o *Cherenkov telescope array* (CTA) para esses possíveis sinais.

Palavras-chave: Matéria escura. Mediadores de vida-longa. Sistema solar. Raios gama.

Referências:

1 BERTONE, G.; TAIT, T. M. P. A new era in the search for dark matter. **Nature**, v. 562, n. 7725, p. 51-56, 2018.

2 LEANE, R. K.; NG, K. C. Y.; BEACOM, J. F. Powerful solar signatures of long-lived dark mediators. **Physical Review D**, v. 95, n. 12, p. 123016-1-123016-16, 2017.

PG63

Caracterização estrutural e funcional de três enzimas com potencial uso biotecnológico da rota biossintética D-manose / L-galactose do ácido L-ascórbico de Myrciaria dubia "camu-camu"

SANTILLAN, J. A. V.[1]; CABREJOS, D. A. L.[1]; GARRATT, R.[1]

jvargas17@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Na Amazônia, os frutos de *Myrciaria dubia* (camu-camu ou araçá) são muito procurados devido ao seu alto teor de L-ácido ascórbico (AsA) ou vitamina C (1), representando uma alternativa para o desenvolvimento de processos biotecnológicos de produção de AsA, entre outros processos. No camu-camu, existem 5 vias metabólicas para a biossíntese de AsA (2), porém nenhuma foi caracterizada nesta espécie. Portanto, o objetivo geral deste trabalho é caracterizar estrutural e funcionalmente três enzimas com potencial uso biotecnológico da via D-manose/L-galactose de camu-camu. As sequências foram otimizadas e ligadas ao vetor de expressão (pET-TOPO), e expressas em *E. coli* Rosetta BL21 (DE3). As três enzimas, L-galactose GDP-D-manose 3´,5´ epimerase (GME), desidrogenase (GHD) e L-galactono- 1,4 - lactona desidrogenase (GalDH), foram purificadas por cromatografia de afinidade e exclusão molecular. GDH e GalDH provou, em solução, ser um monômero, também mostraram atividade contra L-galactose e L-galactono 1,4- lactona, respectivamente, enquanto GME provou ser dímero, em solução. Os ensaios de cristalização foram satisfatórios para GalDH, porém a estrutura cristalográfica ainda não foi resolvida. É necessário um maior acúmulo de dados para que o entendimento de suas funções seja elucidado.

Palavras-chave: Camu-camu. Cristalização. Função.

Referências:

1 ARELLANO-ACUNA, E.; ROJAS-ZAVALETA, I.; PAUCAR-MENACHO, L. M. Camu-camu (*Myrciaria dubia*): fruta tropical de excelentes propiedades funcionales que ayudan a mejorar la calidad de vida. **Scientia Agropecuaria**, v. 7, n. 4, p. 433-443, 2016.

2 CASTRO NETO, J. C. *et al*. De novo assembly and functional annotation of *Myrciaria dubia* fruit transcriptome reveals multiple metabolic pathways for L-ascorbic acid biosynthesis. **BMC Genomics**, v. 16, p. 997-1-997-15, Nov. 2015. DOI 10.1186/s12864-015-2225-6.

206

PG64
Invariância conforme no modelo XY

RAMOS, L.[1]; ALCARAZ, F. C.[1]
lucas.morais@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Investigar a criticalidade de uma cadeia quântica de spin é um problema importante em física moderna. Várias propriedades universais dessa criticalidade são descritas por uma Teoria de Campos Conformes (CFT). (1) Uma das cadeias quânticas mais estudadas é a cadeia XY, que é invariante conforme e possui carga central c=1. A partir dessas motivações, objetivou-se neste trabalho explorar a cadeia quântica XY de modo a obter sua carga central, bem como a torre conforme que caracteriza seu espectro de energia. A estrutura de torre prevista pela CFT fornece tanto os operadores primários da teoria quanto as dimensões anômalas associadas a esses operadores. (2) Como salientado por Belavin, Polyakov e Zamolodchikov, as dimensões anômalas governam o comportamento crítico de uma Hamiltoniana quântica de spin. (3) Em nosso caso, isto significa que para cada operador primário com uma certa dimensão anômala na torre conforme, há um conjunto de autoestados correspondentes na Hamiltoniana do modelo XY. O conhecimento destes autoestados fornece informações acerca dos expoentes críticos do modelo.

Palavras-chave: Criticalidade. Invariância conforme. Modelo XY.

Referências:

1 ALCARAZ, F. C.; BARBER, M. N.; BATCHELOR, M. T. Conformal invariance, the XXZ chain and the operator content of two-dimensional critical systems. **Annals of Physics**, v. 182, n. 2, p. 280-343, Mar. 1988.
2 WOYNAROVICH, F. Excitation spectrum of the spin-(1/2) Heisenberg chain and conformal invariance. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 3, p. 259-261, July 1987.
3 BELAVIN, A. A.; POLYAKOV, A. M.; ZAMOLODCHIKOV, A. B. Infinite conformal symmetry of critical fluctuations in two dimensions. **Journal of Statistical Physics**, v. 34, n. 5-6, p. 763-774, Mar. 1984.

207

PG65

Isometria acompanhante e conexões no espaço de estados puros

MAGNO, G. F.[1]; GROSSI, C. H.[2]; SOARES PINTO, D. O.[1]

gabriel.magno@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - USP

Neste trabalho iremos apresentar o resultado desenvolvido acerca do estudo da estrutura de fibrado principal intrı´nseca ao espaço de estados puros (1) visando determinar uma conexão para este fibrado utilizando o conceito de isometrias acompanhantes, (2-3) queremos então comparar a conexão obtida com a conexão de Berry para este fibrado, evidenciando como a abordagem via formalismo geométrico obtém de maneira protocolar resultados de interesse físico.

Palavras-chave: Fibrado principal. Conexões. Isometria acompanhante.

Referências:

1 ANDERSSON, O. **Holonomy in quantum information geometry**. 2018. 84 p. Thesis (Licentiate of Philosophy in Theoretical Physics) - Department of Physics, Stockholm University, Sweden, 2018.
2 ANAN'IN, S. **Reflections, bendings, and pentagons**. Disponível em: https://arxiv.org/pdf/1201.1582.pdf. Acesso em: 16 jun. 2021.
3 ANAN'IN, S.; GONÇALVES, E. C. B.; GROSSI, C. H. Grassmannians and conformal structure on absolutes. **Advances in Applied Clifford Algebras**, v. 29, n. 1, p. 5-1-5-10, 2019.

208

PG66

Potenciais eletromagnéticos sintéticos e as propriedades espinoriais dos condensados de Bose-Einstein

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

mario.donato@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A *condensação de Bose-Einstein* é um famoso fenômeno físico caracterizado pelo adensamento de partículas no estado de menor energia de um sistema bosônico quando abaixo de uma temperatura crítica (tipicamente próxima do zero absoluto). Com a emergência de *coerência espontânea* entre as partículas do sistema, a fase condensada é bem descrita em termos de um *parâmetro de ordem* (aproximação de *campo médio*). Em particular, quando diferentes estados de spin coexistem em um condensado de Bose-Einstein (CBE *espinorial*), o parâmetro de ordem que o descreve adquire propriedades *simétricas* e *topológicas* não triviais, evidentes nos diversos observáveis do sistema. (1) Da estrutura espinorial (*vetorial*) do parâmetro de ordem, termos análogos a *potenciais eletromagnéticos* (artificiais/sintéticos) surgem naturalmente na modelagem do sistema (mesmo considerando partículas eletricamente neutras) e são capazes de descrever cargas topológicas que um CBE pode comportar. (1) Em geral, a estrutura espinorial da fase condensada não está restrita apenas ao parâmetro de ordem. Segundo a análise contida na dissertação de mestrado do autor (em vias de ser depositada), o *operador de campo* que descreve os estados excitados quânticos do sistema (isto é, aqueles que não contribuem com o condensado) adquire estrutura espinorial quando as propriedades simétricas e topológicas da fase condensada não são triviais. Neste trabalho, visamos discutir os paralelos existentes entre as propriedades simétricas, topológicas, espinoriais e eletromagnéticas sintéticas dos CBEs, abordando o que já foi feito (1) e a perspectiva do futuro da pesquisa nessa área.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstein. Simetria. Topologia. Eletromagnetismo. Espinores.

Referências:

1 KAWAGUCHI, Y.; UEDA, M. Spinor Bose-Einstein condensates. **Physics Reports**, v. 520, n. 5, p. 253-381, Nov. 2012. DOI 10.1016/j.physrep.2012.07.005.

PG67

Sensing properties of In2O3-SnO2 and rGO/In2O3-SnO2 towards ozone gas

ENSUNCHO, L.[1]; MASTELARO, V. R.[1]

laureanoensuncho@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Nowadays, continuous attempts are being employed to obtain gas sensors materials with high sensitivity, fast response, good selectivity, and low detection limits. Resistive-based gas sensors based on semiconductor metal oxides (SMOs) are among the most widely applied as gas detection applications. (1) However, their poor selectivity and high operating temperature have given rise to the need to implement several strategies to overcome these drawbacks and, at the same time, reach enhanced sensitivity. (2) Among them, binary, ternary metal oxides, variations in sintering conditions, and implementing SMOs with other materials such as reduced graphene oxide (rGO) have been implemented to improve gas sensor parameters. (1-2) In this context, we study the influence of deposition parameters on the gas sensing properties of In2O3-SnO2 (ITO) compound regarding ozone (O3) detection through the RF magnetron sputtering technique. Moreover, deposition of ITO on the reduced graphene (rGO) surface (rGO/ITO composite) was achieved, and studied its effect on O3 gas detection. Our results indicate that the ITO sample has a higher response than the rGO/ITO composite. Still, the rGO/ITO composite shows shorter response and recovery times than the ITO compound.

Palavras-chave: Sputtering. Ozone. Gas sensor. ITO. rGO.

Referências:

1 MIRZAEI, A. *et al.* Resistive gas sensors based on metal-oxide nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 126, n. 24, ´p. 241102-1-241102-24, 2019.
2 MALIK, R. *et al.* Functional gas sensing nanomaterials: a panoramic view. **Applied Physics Review**, v. 7, n. 2, p. 021301-1-021301-99, 2020.

210

PG68

Ativação da LPMO do organismo Myceliophthora thermophila utilizando fotossensibilizadores e avaliação da sua atividade oxigenase e peroxigenase na presença de diferentes agentes redutores

VACILOTTO, M. M.[1]; POLIKARPOV, I.[1]; PELLEGRINI, V. O. A.[1]; SEPULCHRO, A. G. V.[1]

milenamvacilotto@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a descoberta de monooxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs, do inglês *Lytic Polysaccharide Monooxygenases*) em 2010, a degradação da biomassa lignocelulósica tem sido revolucionada. A clivagem oxidativa de polissacarídeos recalcitrantes, como a celulose e quitina, impulsiona a despolimerização de biopolímeros, que concomitante com a atividade sinérgica de LPMOs com glicosil hidrolases, contribui para a atual eficiência de coquetéis celulolíticos comerciais amplamente utilizados a nível industrial. (1) Estudos mostram que essas enzimas dependentes de cobre necessitam de um doador de elétrons externo para completar seu ciclo catalítico, tais como pequenas moléculas redutoras (ex: ácido ascórbico), lignina e outras proteínas (ex: celobiose desidrogenase (CDH)). Recentemente, descobriu-se que fotobiossistemas também podem ativar LPMOs, como é o caso da clorofilina. (2) Ademais, LPMOs parecem ser capazes de utilizar tanto O2 quanto H2O2 como co-substratos. (3) Nesse sentido, o projeto em questão se propõe estudar a ativação da LPMO de *Myceliophthora thermophila* (MtLPMO9A), uma enzima com atividade auxiliar pertencente à família 9, segundo o banco de dados CAZy (Carbohydrate-Active EnZymes), utilizando fotossensibilizadores e avaliar sua atividade oxigenase e peroxigenase na presença de diferentes agentes redutores. Resultados preliminares mostraram que a ativação da MtLPMO9A com pirogalol ou ácido gálico é potencializada na presença de H2O2, enquanto o ácido ascórbico com peróxido reduz a atividade enzimática. No perfil de produto liberado, utilizando celulose amorfa como substrato, o ácido ascórbico foi muito mais eficiente nos primeiros tempos de reação. Por fim, a LPMO alvo do estudo mostrou que pode constituir um fotobiossistema, uma vez que foi ativada com sucesso na presença de clorofilina, de forma dependente da concentração do fotossensibilizador.

Palavras-chave: LPMO. H2O2. Fotossensibilizador.

Referências:

1 CHYLENSKI, P. *et al.* Lytic polysaccharide monooxygenases in enzymatic processing of lignocellulosic biomass. **ACS Catalysis**, v. 9, n. 6, p. 4970-4991, 2019.
2 CANNELLA, D. *et al.* Light-driven oxidation of polysaccharides by photosynthetic pigments and a metalloenzyme. **Nature Communications**, v. 7, p. 11134-11134-8, 2016. DOI 10.1038/ncomms11134.
3 BISSARO, B. *et al.* Oxidative cleavage of polysaccharides by monocopper enzymes depends on H2O2. **Nature Chemical Biology**, v. 13, n. 10, p. 1123-1128, 2017.

211

PG69

Quantificando recursos para o mecanismo de Page-Wootters: assimetria compartilhada como entropia relativa de emaranhamento

CARMO, R. S.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]

rafael.carmo@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Recentemente, certa atenção tem sido dada ao chamado mecanismo Page-Wootters (1) de relógios quânticos. Nele considera-se o tempo como um parâmetro inacessível, sendo que sua aparente passagem seria um fator emergente de correlações entre subsistemas de um estado global. Entre as várias propostas para explorar o mecanismo usando técnicas mais modernas, algumas optaram usar uma perspectiva de informação quântica, definindo e usando medidas informativas para quantificar o quão bem um sistema quântico R pode servir referencial para outro sistema quântico S. Neste trabalho (2), exploramos a proposta com base na teoria de recursos da assimetria, conhecida como assimetria mútua ou compartilhada, que na verdade é equivalente à abordagem da teoria da coerência no caso de interesse aqui: referenciais quânticos descritos pelo U (1) grupo compacto. Estendemos alguns resultados anteriores da literatura sobre assimetria compartilhada e o mecanismo Page-Wootters (3) para casos mais gerais, culminando na enunciação de um teorema relacionando assimetria compartilhada de um estado bipartido S+R com a entropia relativa de emaranhamento de estados internos nos setores de carga do Espaço de Hilbert. Usando este resultado, nós reinterpretamos a relação entre o mecanismo de Page-Wootters e emaranhamento além de também abrimos alguns caminhos para novos estudos.

Palavras-chave: Emaranhamento. Fundamentos da mecânica quântica. Teoria de recursos.

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 CARMO, R. S.; SOARES-PINTO. D. O. Quantifying resources for the Page-Wootters mechanism: shared asymmetry as relative entropy of entanglement. **Physical Review A**, v. 103, n. 5, p. 052420-1-052420-13, 2021.
3 MARTINELLI, T.; SOARES PINTO, D. O. 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, 2019.

212

PG70
An information geometric approach to holography

FIUSA, G.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]
gcafiusa@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The search for a complete theory of quantum gravity remains the biggest challenge for high energy theoretical physics. Despite many proposed approaches, with string theory being the most promising one, it is still unclear. A remarkable contribution was due to Maldacena, in his landmark paper (1), he showed that a particular kind of string theory is dual to a Yang-Mills theory, his ideas were developed into the AdS/CFT correspondence (also known as a holographic duality), which consists of a mathematically precise description of duality between a quantum theory of gravity and a conformal field theory. In the context of the correspondence, Ryu and Takayanagi (2) showed that entanglement entropy, which is a quantum information-theoretic quantity, can be calculated holographically, serving as both evidence for the duality as well as a tool to further explore the consequences and properties of the AdS/CFT correspondence. Miyaji *et al.* (3) showed that the Fisher metric, which provides the distance between quantum states, is another example of an information-theoretic quantity that can be calculated holographically in a precise manner. In this work, we propose to extend the ideas present in the previous articles to other information metrics, such as the Wigner-Yanase and the Bogoliubov metrics, to define a precise and general holographic description of information metrics.

Palavras-chave: Information geometry. Quantum information theory. Holography.

Referências:

1 MALDACENA, J. M. The large N limit of superconformal field theories and supergravity. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 38, n. 4, p. 1113-1133, 1999.
2 RYU, S.; TAKAYANAGI, T. Holographic derivation of entanglement entropy from the anti-de Sitter space/conformal field theory correspondence. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 18, p. 181602-1-181602-4, 2006.
3 MIYAJU, M. *et al.* Distance between quantum states and gauge-gravity duality. **Physical Review Letters**, v. 115, n. 26, p. 261602-1-261602-5, 2015.

213

PG71

Direct DNA damage simulations of Solar Wind's protons using the Geant4-DNA Monte Carlo simulation toolkit in D. radiodurans and E. coli

AGUERA, J. J. M.[1]; GALANTE, D.[2]

jonjulion@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - CNPEM

DNA direct damage caused by Solar Wind's (SW) protons were simulated and calculated using the DNA extension for low energies from the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit (1-3) in *D. radiodurans* and *E. coli* bacteria. Direct DNA damages were calculated as the mean numbers of DNA Strand Breaks(SBs) using the clustering example contained in the DNA extension. This example implements an adapted DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise) algorithm to calculate the mean numbers of Single Strand Breaks (SSBs), divided in simple and complex SSBs (sSSBs and cSSBs), and Double Strand Breaks (DSBs). The mean Absorbed Dose, in Gy, and the mean formed cluster of damage sizes, in nm, are also calculated by the program. SW's proton energies values were based on the ones used in the Solar Wind Electron Proton and Alpha Monitor (SWEPAM) present in the Advanced Composition Explorer (ACE) spacecraft that measures the SW's protons differential fluence rates daily. Proton sources were simulated in two main forms, with mono-energetic and Power Law energy spectra. Results presented here are shown in mean SBs yields per Gy and SBs per Gy and per Mbp for both model organisms and sources.

Palavras-chave: DNA. GEANT4. DNA damage. DSB.

Referências:

1 VILLAGRASA, C.; FRANCIS, Z.; INCERTI, S. Physical models implemented in the Geant4-DNA extension of the Geant4 toolkit for calculating initial radiation damage at the molecular level. **Radiation Protection Dosimetry**, v. 143, n. 2-4, p. 214-218, Feb. 2011.
2 FRANCIS, Z.; VILLAGRASA, C.; CLAIRAND, I. Simulation of DNA damage clustering after proton irradiation using and adapted DBSCAN algorithm. **Computer Methods and Programs in Biomedicine**, v. 101, n. 3, p. 265-270, Mar. 2011.
3 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, Dec. 2015.

PG72
Dinâmica de um estado acoplado com o banho

GOETTEMS, E. I.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]; VALENTE, D. M.[2]; AFONSO, R.[1]
elisagtt@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal do Mato Grosso - UFMT

Neste trabalho, a fim de fazer estudo complementar dos artigos (1-3), consideramos um estado inicial emaranhado e sua dinâmica dada a partir do acoplamento com um banho térmico para analisar o que ocorre com a entropia e produção de entropia instantânea deste estado. Foi estudado inicialmente a normalização do operador densidade do artigo (1) no limite de tempos longos e acoplamento fraco. Nesse limite temos que o estado do sistema será modificado e encontramos a expressão para a sua normalização. Foi possível verificar que no limite adequado recupera-se a função partição de um oscilador harmônico. Este resultado é importante para avaliarmos a validade do ansatz proposto em (1) e, em seguida, propor um ansatz parecido para duas partículas acopladas com o banho. Tendo encontrado uma expressão para o ansatz para duas partículas, a tarefa agora é reproduzir as contas de (1) utilizando esse novo ansatz, e fazer a mesma avaliação da função partição e entropia no equilíbrio. Outro estudo que ainda está em andamento é a derivação da expressão para a matriz densidade em função do tempo, supondo um acoplamento não-linear com o banho. Para isso vamos usar o formalismo de integral de trajetórias e espera-se que o resultado dessa matriz densidade coincida com a dada em (1) para expansão em primeira ou segunda ordem da exponencial. Esse resultado é importante para identificarmos o papel da não-linearidade no acoplamento.

Palavras-chave: Termodinâmica quântica. Dinâmica quântica.

Referências:

1 WEIDERPASS, G. A.; CALDEIRA, A. O. von Neumann entropy and entropy production of a damped harmonic oscillator. **Physical Review E**, v. 102, n. 3, p. 032102-1-032102-10, Sept. 2020.
2 DUARTE, O. S.; CALDEIRA, A. O. Effective quantum dynamics of two Brownian particles. **Physical Review A**, v. 80, n. 3, p. 032110-1-032110-10, Sept. 2009.
3 VALENTE, D. M.; CALDEIRA, A. O. Thermal equilibrium of two quantum Brownian particles. **Physical Review A**, v. 81, n. 1, p. 012117-1-012117-7, Jan. 2010.

215

PG73

Implementation and simulation of drift-diffusion models for organic mixed conductor devices

UNIGARRO, A. D. P.[1]; GÜNTHER, F.[1]; FARIA, G.[1]

ap.unigarro@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

In the past years, organic electrochemical transistors (OECTs) have emerged as potential transducers in applications that require the conversion of ion fluxes to electronic current. For the rational optimization and understanding of the fundamentals of OECTs and OECT-based applications, however, it is essential to have theoretical models that can predict the experi-mental data. (1) The OECT models, which have majorly been discussed during the past dec-ade, mostly originate from Ohm's law where the ion flux from the electrolyte into the organic, semiconducting layer takes place only due to an electrical field. These models are efficient to describe the steady-state operations of OECTs, but are rather limited for the predictions of transient behaviors. More recent models take a diffusion term into account in order to im-prove the existing approaches. For example, Coppedè *et al.* (2) developed a model for which the analytical solution of the Nernst-Planck equation in one dimension with standard boundary conditions was used. In doing so, the diffusion coefficients of different metal cations could be fitted to experimental transient measurement with a very good agreement. In their work, however, only metal cations of the electrolyte were considered. In our work, we intend to solve the equations numerically to overcome the limita-tions of the analytical solution. This allows us to go beyond the standard boundary conditions and also to analyze the impact of other alterations, such the existence of anion, variations in the diffusion coefficient between electrolyte and polymer film, etc.

Palavras-chave: OECT. Finite differences. Simulation.

Referências:

1 COLUCCI, R. *et al.* Recent advances in modeling organic electrochemical transistors. **Flexible and Printed Electronics**, v. 5, n. 1, p. 013001-1-013001-16, 2020.
2 COPPEDÈ, N.; VILLANI, M.; GENTILE, F. Diffusion driven selectivity in organic electrochemical transistors. **Scientific Reports** v. 4, p. 4297-1-4297-7, 2014. DOI 10.1038/srep04297.

216

PG74

Enterococcus faecalis: cristalografia e cinética enzimática de proteínas associadas à formação de biofilme

CLEMENTINO, L.; NASCIMENTO, A. S.[1]

livia.clementino@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A resistência de patógenos a antimicrobiano é um problema de saúde pública, com tendência a se agravar ao longo do tempo. A consequência da resistência é refletida no número de mortes provocadas por infecções de tais microrganismos. No contexto de resistência bacteriana a antibióticos, iniciou-se o estudo de quatro enzimas presentes no *cluster* gênico epa. (1-2) As proteínas Epa sintetizam e exportam alguns carboidratos constituintes da parede celular de *Enterococcus*, envolvidos também na composição de biofilmes. Dessas quatro enzimas, a proteína EpaE foi a única a apresentar rendimento e estabilidade razoáveis para ser submetida a uma triagem envolvendo múltiplas condições de cristalização. Um conjunto de dados foi coletado na linha Manacá do anel síncroton brasileiro, o Sirius. O grupo espacial do cristal é o P21, e apresenta fração de twinning pseudomeroedral. A estrutura da EpaE foi determinada a 2.75 Å de resolução, e ainda está em fase de refinamento. Ela tem conformação tetramérica na unidade assimétrica, com um enovelamento do tipo Rossman. Análises realizadas pelo servidor PDBePISA revelam que as interfaces formadas pelas cadeias A e B, e C e D são mais estáveis do que a B e C, e a A e D. O servidor DALI indicou as proteínas mais semelhantes à EpaE em nível de estrutura, e o alinhamento com elas indicou a região do sítio ativo e do sítio alostérico da enzima na região próxima aos resíduos GLN24, PRO83,ASP108 e ASP223, e TYR112, GLU253 e ARG257, respectivamente. Como a enzima EpaE apresentou ausência de densidade eletrônica em algumas regiões da sua estrutura, ela será co-cristalizada com dTTP, glicose-1-fosfato e Mg+2 como uma tentativa de estabilizar estas regiões e obter um modelo mais completo. A padronização da metodologia de cinética enzimática foi iniciada, baseando-se nos protocolos com reagente verde de malaquita. A EpaE é a primeira enzima do *cluster* epa a ter estrutura resolvida.

Palavras-chave: Resistência bacteriana a antibióticos. *Enterococcus faecalis*. Biofilme. *Cluster* epa.

Referências:

1 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, 2015.

2 XU, Y. *et al*. Analysis of a gene cluster of *Enterococcus faecalis* involved in polysaccharide biosynthesis. **Infection and Immunity**, v. 68, n. 2, p. 815-823, 2000.

217

PG75

Desenvolvimento de um sistema com arquitetura em nuvem para a detecção de ceratocone subclínico por meio de deep learning, utilizando polinômios de Zernike e imagens de topografia e de paquimetria de córnea

OLIVEIRA, L. O.[1]; CASTRO NETO, J. C.[1]; SIQUEIRA, W. C. A.[2]; OLIVEIRA, A. O.[1]; TAGUCHI, F.[2]
lorlandi@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Escola Paulista de Medicina - UNIFESP

O ceratocone é uma doença degenerativa em que a córnea apresenta instabilidade estrutural ou biomecânica, causando alterações em sua forma. (1) Trata-se de uma doença que se inicia, geralmente, na adolescência e progride até a quarta década de vida, aproximadamente, podendo levar à perda total ou parcial da visão. Apesar de não existir tratamento que regrida o estágio da doença, existem técnicas capazes de estabilizar o quadro clínico do indivíduo, como o *crosslinking*, por exemplo. Em estágios mais avançados da doença, o diagnóstico é uma tarefa simples para os especialistas da área, pois os sintomas são característicos; o desafio encontra-se, no entanto, no estágio subclínico, que é aquele em que o indivíduo não apresenta quaisquer sintomas. Os exames utilizados para o diagnóstico do ceratocone são a topografia de córnea e a tomografia de Scheimpflug, que juntos fornecem as medidas de curvatura e paquimetria da córnea, além dos coeficientes dos polinômios de Zernike. Com o surgimento do paradigma da *Saúde 4.0*, que está diretamente relacionado a conceitos como conectividade em nuvem, Inteligência Artificial aplicados à área da saúde para a melhoria da conectividade entre processos e da qualidade de diagnósticos, é preciso reestruturar processos já existentes, de forma a refletir os benefícios de tais melhorias à sociedade. Este projeto de pesquisa insere-se neste contexto, buscando o desenvolvimento de um sistema baseado em *deep learning*, utilizando redes neurais convolucionais, para a detecção do ceratocone em seu estágio subclínico, utilizando polinômios de Zernike e imagens de mapas de topografia e de paquimetria da córnea. Esse sistema será implantado em uma arquitetura em nuvem e usará, como entrada, imagens oriundas de equipamentos de diferentes fabricantes, visando ampliar o número de diagnósticos precoces realizados por clínicas e hospitais, causando impactos positivos à saúde visual da população.

Palavras-chave: Ceratocone subclínico. Deep learning. Topografia de córnea.

Referências:

1 RABINOWITZ, Y. S. Keratoconus. **Survey of Ophthalmology**, v. 42, n. 4, p. 297-319, 1998.

218

PG76

Desenvolvimento de um sistema inteligente aplicado à Agricultura de Precisão para classificação de plantas de soja e ervas daninhas em tempo real utilizando imagens multiespectrais

ODA, Y. S.[1]; CASTRO NETO, J. C.[1]

yuri.oda@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, a Agricultura de Precisão destaca-se como uma das áreas mais promissoras para o desenvolvimento de tecnologias no país. Algumas tecnologias advindas dessa área incluem, por exemplo, o mapeamento de áreas de produtividade e o desenvolvimento de sistemas para análises de solo, sempre visando o uso inteligente dos recursos durante o manejo das culturas e auxiliando o produtor durante as etapas de tomada de decisão. (1) Dentre os problemas da agricultura moderna, está o uso intensivo e de forma não localizada de herbicidas que, além de ser prejudicial ao meio ambiente, contribui para o desenvolvimento de ervas daninhas resistentes aos herbicidas aplicados em campo. (2) Visando contornar este problema, o presente projeto visa, através de métodos de Visão Computacional e Inteligência Artificial, o desenvolvimento de um sistema capaz de obter imagens multiespectrais do plano superior de plantas da lavoura de soja, classificá-las em plantas de soja ou ervas daninhas em tempo real e fazer aplicações de herbicidas localizadas, ou seja, apenas nas ervas daninhas detectadas. Para a captura de imagens, serão realizadas duas abordagens: a primeira utilizará um conjunto de quatro câmeras de sensor CMOS monocromático, cada uma contendo um filtro passa banda diferente, de forma com que as câmeras captem os comprimentos de onda do vermelho (R), verde (G), azul (B) e infravermelho próximo (NIR) separadamente; a segunda abordará a instrumentação de uma câmera multiespectral utilizando uma câmera monocromática acoplada a um filtro multiespectral feito sob medida. Em ambas as abordagens, as câmeras serão instaladas em um trator e a captura de imagens será feita à partir do movimento deste. As imagens obtidas durante os experimentos de campo iniciais serão utilizadas para a construção de um banco de imagens multiespectrais contendo as classes supracitadas que posteriormente será utilizado para treinar uma rede neural convolucional para tarefas de classificação. Os sistemas desenvolvidos serão unificados e controlados por um sistema embarcado com *hardware* adequado para a realização de experimentos de campo visando comprovar a eficácia do sistema. Nos primeiros meses, as câmeras monocromáticas foram adquiridas e foi construída uma estrutura de madeira com trilhos de alumínio (compostos por duas barras V-slot *open build system*) para que a captura de imagens ocorra durante o movimento do conjunto de câmeras em uma primeira prova de conceito. Neste sistema, uma *Raspberry Pi 4* foi usada para controlar as câmeras e um *Arduíno Uno* foi usado para controlar um motor de passo NEMA conectado em um sistema de polias GT2 responsável por tensionar o sistema e promover o movimento das câmeras, simulando o movimento do trator. Na parte inferior da estrutura de madeira, serão posicionadas bandejas com cultivo de plantas de soja e ervas daninhas. Para essa prova de conceito inicial, foi encomendada a confecção dos quatro filtros espectrais passa banda (R,G,B e NIR) para cobrir os sensores das quatro câmeras e o algoritmo YOLO v3 (do inglês, *"You Only Look Once"*) será utilizado para detecção de ervas daninhas em tempo real e adaptado para receber imagens em diferentes comprimentos de onda.

219

Palavras-chave: Agricultura de precisão. Imagens multiespectrais. Inteligência artificial. Soja e ervas-daninhas

Referências:

1 ELI-CHUKWU, N. C. Applications of artificial intelligence in agriculture: a review. **Engineering, Technology and Applied Science Research**, v. 9, n. 4, p. 4377-4383, 2019.
2 SMITH, M. J. Getting value from artificial intelligence in agriculture. **Animal Production Science**, v. 60, n. 1, p. 46-54, 2020.

220

PG77

Fabricação de microambientes 3D para o desenvolvimento de micro-organismos

MORAES, J. Q. R.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]; OTUKA, A. J. G.[1]

jonathas.moraes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Probióticos são micro-organismos que trazem benefícios ao hospedeiro, podendo apresentar efeitos imunológicos positivos ao estimular o aumento de bactérias benéficas na microbiota intestinal. (1) Estudos têm mostrado que probióticos têm a capacidade de amenizar sintomas de diversas condições médicas, como por exemplo câncer de cólon e alterações colesterolêmicas (1), Alzheimer (2), entre outras. Nesta direção, é importante determinar aspectos fundamentais da formação de biofilmes de probióticos, visando elaborar mecanismos de entrega mais eficientes. Uma forma viável de se estudar esses organismos é o desenvolvimento de microplataformas biocompatíveis, utilizando a técnica de polimerização via absorção de dois fótons (P2F), técnica versátil e de alta resolução espacial. Proposta por Maria Göppert-Mayer em 1931 (3), a absorção de dóis fótons (A2F) é um processo óptico não linear em que campos elétricos de altas intensidades provocam efeitos nas ligações interatômicas da matéria. Quando moléculas fotossensíveis performam A2F ao serem excitadas por feixes de alta intensidade, os radicais livres gerados promovem a polimerização de uma resina de interesse, dando origem à P2F. Nesse trabalho, utilizamos um laser Ti:safira, centrado em 780 nm, com largura de banda 50 nm, taxa de repetição de 86 MHz e pulsos de 100 fs para fabricar estruturas poliméricas com geometria tridimensional visando estudar sua biocompatibilidade mediante o crescimento de filmes biológicos de *Lactobacillus sp.*, bactérias muito utilizadas em probióticos comerciais. Além disso, apresentamos um conjunto de caracterizações iniciais de tais plataformas, realizadas para obter as melhores condições para a formação de biofilmes dessas bactérias.

Palavras-chave: Microambientes. Probióticos. Polimerização via absorção de dois fótons.

Referências:

1 SAAD, S. M. I. Probióticos e prebióticos: o estado da arte. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 42, n. 1, p. 1-16, 2006.
2 AKBARI, E. *et al*. Effect of probiotic supplementation on cognitive function and metabolic status in Alzheimer's disease: a randomized, double-blind and controlled trial. **Frontiers in Aging Neuroscience**, v. 8, p. 256-1-256-8, 2016. DOI 10.3389/fnagi.2016.00256.
3 GÖPPERT-MAYER, M. Über elementarakte mit zwei quantensprüngen. **Annalen der Physik**, v. 401, n. 3, p. 273-294, 1931.

221

PG78

Simulation of a nanoplasmonic wave plate based on elliptical bull's eye nanostructure

CALDERÓN, G. L.[1]; RIVERA, V. A. G.[2]; MAREGA JUNIOR, E.[1]

glozano@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Facultad de Ciencias Físicas - UNMSM

Polarization state is a fundamental property of light, and its manipulation exhibits important applications in the transmission of information on optical technologies. Classically, wave plates, optical rotators and polarizers are employed for this purpose. Nevertheless, the development of polarization controllers on the nanoscale by using noble materials has attracted the attention of researchers in the last decade. In this context, plasmonic nanostructures in thin metals exhibit remarkable properties such as the generation of surface plasmon polaritons (SPPs) and the extraordinary optical transmission, which is a consequence of the SPP-light coupling, and can be used for polarization controlling. In this research, an elliptical bull's eye nanostructure in gold thin film was simulated with the finite-difference time-domain (FDTD) method and linear to circular polarization in the near field was obtained. This nanostructure gives rise to beaming with a remarkable focusing property on subwavelength regime. (1) The difference between the long and short axis of the elliptical grooves adds a phase shift between two orthogonal components of the SPPs. Moreover, the polarization states were characterized by the Stokes parameters and plotted in the Poincare sphere to see the trajectory of the generated states. The maximum transmission is approximately peaked at 980 nm and the phase shift $\Delta\phi \approx \pi/2$, which leads to obtain left and right circular polarization, respectively, for specific polarization angles. Therefore, the system acts as a nanoplasmonic wave plate and can be implemented for photonic and signal processing applications.

Palavras-chave: Bull's eye. Plasmonics. Birefringence. Polarization controlling.

Referências:

1 CARRETERO-PALACIOS, S. *et al.* Mechanisms for extraordinary optical transmission through bull's eye structures. **Optics Express**, v. 19, n. 11, p. 10429-10442, 2011.

222

PG79

Teoria de grupos aplicada ao método k.p: Hamiltoniano Wurtzita 8x8

OLIVEIRA, C. E.[1]; SIPAHI, G.[1]

caio.physics017@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Do ponto de vista matemático, a teoria de grupos investiga um conjunto de operações que possuem certas propriedades especiais (1-2), chamamos esse conjunto de operações de grupo, podemos entender a teoria de grupos em poucas palavras como a matemática da simetria. (1) O uso da teoria de grupos em física atômica é antigo (2), E. Wigner, em 1926, demonstrou que teoria de grupos era uma excelente ferramenta para de analisar espectros atômicos. Tal realização foi um marco, pois despertou o interesse em utilizar teoria tal para simplificar o tratamento de sistemas de muitos corpos. (2) O foco deste trabalho está em realizar uma boa descrição das bandas de energia em Hamiltonianos Wurtzita **k.p** 8x8 sendo uma extensão do trabalho apresentado no ano anterior. O objetivo é discutir o modelo além de falar sobre as dificuldades que se encontra ao realizar o fit dos parâmetros de banda.

Palavras-chave: Solid state. k.p model. Wurtzite.

Referências:

1 INUI, T.; TANABE, Y.; ONODERA, Y. **Group theory and its applications in physics**. Berlin: Springer, 1990. (Springer series in solid-state sciences, v. 78).
2 DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. **Group theory**: application to the physics of condensed matter. Berlin: Springer, 2008.

223

PG80

Produção, caracterização e aplicação de diferentes classes de enzimas com potenciais biotecnológicos e biomédicos

CORTEZ, A.[1]; POLIKARPOV, I.[1]; ARNOLDI, V.[1]; SOUSA, A. N. G. D. D.[1]

anelysecortez@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A primeira etapa deste trabalho consistiu em produzir nanofibras de celulose (nanocelulose) a partir de bagaço de cana-de-açúcar pré-tratado, por meio da ação conjunta de três enzimas conhecidas por agirem sobre componentes celulósicos: uma endoglucanase, uma xilanase e uma enzima de atividade auxiliar denominada monooxigenase lítica de polissacarídeos. Os resultados desta etapa demostraram que a ação cooperativa entre enzimas hidrolíticas e oxidativas é uma alternativa verde e sustentável frente as vias comumente utilizadas para a obtenção de nanofibras de celulose, como a TEMPO-oxidação. Além disso, a nanocelulose obtida enzimaticamente apresentou importantes propriedades de interesse econômico. (1) Com o propósito de dar continuidade à utilização de enzimas para diferentes aplicações e áreas do conhecimento, realizamos uma busca na literatura e encontramos que muitos grupos destas proteínas são utilizados como agentes anti-biofilme. (2) Biofilmes são comunidades de bactérias ou outros microrganismos envoltos por uma matriz polimérica produzida por eles próprios. Essa matriz polimérica extracelular confere aos microrganismos proteção contra diversas ameaças, como por exemplo os antibióticos, promovendo o surgimento de linhagens altamente resistentes. Tais estruturas bacterianas podem ser encontradas aderidas em superfícies abióticas, como por exemplo próteses e cateteres utilizados em tratamentos médicos, ou em superfícies bióticas, como em dentes (placa dental bacteriana) ou tecidos e células (feridas infeccionadas, por exemplo). Assim, diversas são as doenças associadas à formação dessas comunidades bacterianas que, por sua vez, podem contribuir de maneira determinante para o óbito dos pacientes. Por esta razão, biofilmes apresentam grande importância clínica e muitos esforços são destinados à busca de terapias capazes de prevenir ou erradicar biofilmes patogênicos, tendo a matriz polimérica como alvo terapêutico. Nesse sentido, inicialmente sugerimos uma padronização do protocolo com base na recente publicação da revista *Nature Protocols* (3), para estabelecimento do crescimento de biofilmes em nosso laboratório. Utilizamos como modelo o microrganismo *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923) e resultados preliminares indicam que essa linhagem bacteriana forma uma matriz polimérica extracelular mais robusta a depender da concentração de glicose no meio. Após estabelecermos o protocolo para obtenção de biofilmes, pretendemos utilizar diferentes classes de enzimas que possivelmente degradam os constituintes da matriz extracelular polimérica para verificar se apresentam atividade anti-biofilme. Além disso, também projetamos empregar outros microrganismos para obtenção de biofilme e posterior aplicação das enzimas ativas em componentes da matriz.

Palavras-chave: Enzimas. Nanocelulose. Biofilme.

Referências:

1 ROSSI, B. R. *et al*. Cellulose nanofibers production using a set of recombinant enzymes. **Carbohydrate Polymers**, v. 256, p. 117510-1-117510-9, Mar. 2021. DOI 10.1016/j.carbpol.2020.117510.
2 KAPLAN, J. B. Therapeutic potential of biofilm-dispersing enzymes. **International Journal of Artificial Organs**, v. 32, n. 9, p. 545-554, Sept. 2009.
3 HANEY, E. F.; TRIMBLE, M. J.; HANCOCK, R. E. W. Microtiter plate assays to assess antibiofilm

activity against bacteria. **Nature Protocols**, v. 16, n. 5, p. 2615-2632, May 2021.

PG81

Comunicação, comunidade e informação: um estudo da gênese da teoria da informação

PENA, A. B.[1]; SILVA, C. C.[1]

aurelio.pena@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto de mestrado visa investigar a gênese da teoria da informação na física, começamos a análise na invenção dos telégrafos elétricos, ou seja, na primeira metade do século XIX e prosseguiremos estudando os muitos desdobramentos até o os trabalhos da década de 1970. (1) Destacamos, em particular, os célebres trabalhos da década de 1940 (2), para os quais analisaremos o processo de aceitação e reconhecimento dentro das comunidades científicas. Para tal, utilizamos uma abordagem diacrônica, metodologia própria da história da ciência e analisamos o episódio histórico sob a luz do pensamento do sociólogo polonês Ludwik Fleck (3), em particular, analisaremos em detalhe a reação e os papeis das diferentes comunidades científicas na aceitação das interpretações do que viria a ser conhecido como "informação" e suas ramificações.

Palavras-chave: História da física. Teoria da informação. Ludwik Fleck.

Referências:

1 GLEICK, J. **A informação**: uma história, uma teoria, uma enxurrada. Tradução Augusto Calil. São Paulo: Companhia das Letras, 2013.
2 SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **Bell System Technical Journal**, v. 27, n. 3, p. 379-423, 1948.
3 FLECK, L. **Genesis and development of a scientific fact**. Chicago: University of Chicago Press, 2012.

226

PG82

Purificação quântica através de um estado quádruplo para incluir ruído ambiental e aparato de medida na investigação do conceito de complexidade quântica

AUDI, G.[1]; NAPOLITANO, R. J.[1]

gabriel.nogueira.monteiro@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Utilizando as definições usuais de complexidade quântica como guias (1-2), neste mestrado pretendemos investigar como poderia ser generalizada a complexidade quântica de um algoritmo quântico, como o algoritmo de Deutsch-Jozsa (3) sob a influência ruidosa do ambiente. Simultaneamente, porém, vamos considerar também um processo de observação, pelo menos como parte do processamento da informação ao longo da execução do algoritmo. Para poder tratar esse problema, propomos introduzir uma purificação envolvendo quatro espaços de Hilbert idênticos e considerar um estado quádruplo. Faremos uso desse quádruplo produto tensorial de espaços de Hilbert idênticos com inspiração provida pela gravitação quântica, onde é utilizado o chamado estado duplo térmico de campos. Trataremos tanto o ambiente como o processo de medida como campos bosônicos e, assim, muito do que já foi feito no caso do estado duplo térmico de campos poderá ser utilizado.

Palavras-chave: Complexidade quântica. Purificação quântica. Informação quântica.

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. Complexity geometry of a single qubit. **Physical Review D**, v. 100, n. 4, p. 046020-1-046020-20, 2019.
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.

227

PG83

Revelando detalhes estruturais de complexos de septinas humanas por Crio-ME

MENDONÇA, D. C.[1]; PORTUGAL, R. V.[2]; GARRATT, R.[1]

deborah.mendonca@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Laboratório Nacional de Nanotecnologia - CNPEM

Septinas são GTPases do citoesqueleto envolvidas em diversos processos intracelulares importantes, como a divisão celular, tráfego de vesículas, exocitose, entre outros. Elas atuam como barreiras que impedem a difusão livre de componentes da membrana plasmática e também como andaimes, recrutando outras proteínas para certas regiões da célula. Em humanos, alterações nos níveis de expressão das septinas ou mutações em seus genes estão relacionadas com diversas doenças, como alguns tipos de câncer, infertilidade masculina, doenças neurodegenerativas, entre outros. Fisiologicamente, as septinas possuem a capacidade de interagirem entre si e se polimerizarem na forma de heterocomplexos, resultando em filamentos que subsequentemente se organizam em estruturas maiores, como anéis e redes. (1) Entretanto, existem muitos aspectos mecânicos dessas proteínas que não são totalmente compreendidos, incluindo os detalhes estruturais que determinam o agrupamento correto desses heterocomplexos. Em humanos, há a presença de 13 genes que codificam septinas (SEPT1-SEPT12 e SEPT14), que podem ser divididas em 4 grupos (Grupo da SEPT2, Grupo da SEPT6, Grupo da SEPT7, Grupo da SEPT3) com base na similaridade de sequências. As septinas de cada um desses grupos possuem uma localização especifica no complexo, formando, em geral, hexâmeros ou octâmeros. Durante o desenvolvimento desse projeto, foi descoberto que os complexos hexaméricos são formados com a seguinte ordem: SEPT2-SEPT6-SEPT7-SEPT7-SEPT6-SEPT2, contrariando um resultado consagrado na literatura que sugeria uma ordem inversa, com SEPT7 na extremidade do complexo. (2-3) A continuação deste trabalho tem o objetivo de investigar os complexos humanos em termos estruturais utilizando a Criomicroscopia Eletrônica de Transmissão (Crio-ME) aliada à Análise de Partículas Isoladas, contribuindo com um melhor entendimento do mecanismo de automontagem dessas proteínas. O primeiro complexo analisado foi o hexâmero humano composto por SEPT2, SEPT6 e SEPT7. Com o objetivo de evitar a polimerização do complexo em filamentos e obter uma amostra homogênea, foi utilizada uma construção da SEPT2 que mantém apenas seu domínio G (que possui atividade GTPásica), excluindo os domínios N e C terminais que garantem sua polimerização. Com as micrografias coletadas e processadas, foi possível obter um mapa de resolução global 3.4 Å. Na literatura há apenas uma estrutura de um complexo, obtida por cristalografia de raios-X com resolução de 4.0 Å, e composto pelas mesmas septinas estudadas nesse trabalho. O mapa obtido por Crio-ME nesse projeto é o primeiro que proporciona a informação completa de um complexo, além de confirmar, de forma mais direta, a ordem correta com que as septinas interagem para formação desse hexâmero.Com essa melhor resolução, foi possível também observar alguns detalhes estruturais nunca vistos anteriormente, além de uma análise de flexibilidade do complexo com a qual foi possível inferir de que forma os filamentos de septinas interagem com as membranas celulares.

Palavras-chave: Septinas. Microscopia Eletrônica de Transmissão. Crio-ME. Estrutura de proteínas.

Referências:

228

1 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 13, n. 3, p. 183-194, 2012.
2 MENDONCA, D. C. *et al*. A revised order of subunits in mammalian septin complexes. **Cytoskeleton**, v. 76, n. 9-10, p. 457-466, 2019. DOI 10.1002/cm.21569.
3 MCMURRAY, M. A.; THORNER, J. Turning it inside out: the organization of human septin heterooligomers. **Cytoskeleton**, v. 76, n. 9-10, p. 449-456, 2019. DOI 10.1002/cm.21571.

229

PG84

Verificação da taxa do trabalho quântico em um sistema simples

SILVA, L. A. J.[1]; BRITO, F. B.[1]

lais.anjos@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os princípios da termodinâmica clássica possuem a validade comprovada no regime macroscópico. A área da termodinâmica quântica tem por objetivo verificar se esses mesmos princípios podem ser aplicados em sistemas quânticos, procurando identificar sob quais condições essas relações são possíveis ou introduzindo extensões para essas quantidades. Nessa área o sistema quântico aberto pode ser tratado como uma máquina, sendo que esse sistema aberto está interagindo com outro sistema que é tratado como ambiente (1), que em geral não está em um estado de equilíbrio térmico, e juntos eles compõem o sistema completo, chamado de universo quântico . No contexto quântico se faz necessário que novas definições de trabalho e calor sejam adotadas. Neste trabalho estudamos um sistema quântico aberto que consiste em um sistema de dois níveis, esse interage com um pulso de um fóton, tratado como ambiente. (2) A forma da interação revela que pode ocorrer trabalho nesse sistema. (3) Aqui buscamos verificar como as condições impostas ao sistema interferem no trabalho, ou seja, como podemos alterar a quantidade e a taxa temporal com que o trabalho será executado.

Palavras-chave: Termodinâmica quântica. Sistema quântico aberto. Trabalho.

Referências:

1 BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. Oxford: Oxford University Press, 2002.

2 VALENTE, D.; BRITO, F.; WERLANG, T. Dynamic stark shift induced by a single photon packet. **Optics Letters**, v. 42, n. 9, p. 1692-1695, 2017.

3 VALENTE, D. *et al*. Work on a quantum dipole by a single-photon pulse. **Optics Letters**, v. 43, n. 11, p. 2644-2647, 2018.

230

PG85

Automatização da otimização da técnica de contraste de fase para o desenho de potenciais ópticos em tempo real

RAMPIM, A.[1]; MUNIZ, S. R.[1]

airton.rampim@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A área de tecnologias quânticas busca estudar propriedades quânticas da matéria que possam criar tecnologias inovadoras. Uma das abordagens usadas para isso é a simulação quântica, que pode ser implementada usando técnicas de manipulação precisa de sistemas na escala atômica. Um exemplo de plataforma física são átomos ultrafrios aprisionados opticamente, como o condensado de Bose-Einstein usado na construção de um sensor atômico altamente preciso. (1) Nesse estudo, um potencial óptico em formato toroidal foi construído a partir de dois feixes laser modulados espacialmente para aprisionar o condensado. A possibilidade de criar potenciais arbitrários e dinâmicos é de grande interesse prático, tanto para simuladores quânticos como para sensores quânticos baseados em ondas de matéria. Nosso laboratório estuda técnicas de modulação de fase da luz para produzir potenciais ópticos reconfiguráveis, de alta precisão, para o aprisionamento de átomos ultrafrios ou nanopartículas em pinças ópticas. Neste trabalho, exploramos técnicas computacionais de automatizar a correção da modulação de fase da luz usando uma técnica recentemente desenvolvida no nosso laboratório. (2) Mostraremos resultados de um programa desenvolvido para automaticamente reconhecer uma imagem do perfil do feixe laser e projetar um padrão de fase corrigido em um modulador espacial de luz em tempo real. Os primeiros resultados de correção apresentaram uma melhora no nivelamento da luz modulada para a técnica de contraste de fase de ordem zero. Esses resultados preliminares, a princípio, podem ser adaptados e aplicados a outras técnicas de controle óptico.

Palavras-chave: Potenciais ópticos. Contraste de fase. Algoritmo de correção.

Referências:

1 RAMANATHAN, A., *et al.* Superflow in a toroidal Bose-Einstein condensate: an atom circuit with a tunable weak link. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 13, p. 130401-1-130401-4, Mar. 2011.

2 SILVA, P.; MUNIZ, S. R. Generating arbitrary laser beam shapes through phase-mapped designed beam splitting. *In*: SBFOTON INTERNATIONAL OPTICS AND PHOTONICS CONFERENCE, 2021, [*S. l.*]. **Technical Program [...]**. Campinas: Sociedade Brasileira de Ótica e Fotônica - SBFoton, 2021. abstr. 49. Disponível em: https://www.sbfoton.org.br/program/tuesday.html. Acesso em: 24 jun. 2021

PG86

Fabricação de dispositivos fotônicos em SiC com pulsos de femtossegundos

CURVELO, K.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]

kauecurvelo@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A produção de defeitos e guias de onda em SiC (1) é um tópico muito atual e que chama muita atenção devido as propriedades muito similares entre o SiC e o Diamante, com a vantagem de toda uma infraestrutura industrial e tecnológica já existente a favor do SiC. Este projeto de pesquisa de mestrado visa, através de processamento laser com pulsos de femtosegundos, não apenas microfabricar guias de onda em SiC, mas também a geração de defeitos centros de cor de maneira localizada e controlada, o que ainda não foi alcançado. Tais centros de cor serão produzidos já inseridos em cavidades e guias de ondas previamente microfabricados, de forma a auxiliar a ativação e detecção dos mesmos.

Palavras-chave: Centros de Cor. Dispositivos fotônicos. Pulsos de femtosegundos.

Referências:

1 LIU, J. *et al.* Confocal photoluminescence characterization of silicon-vacancy color centers in 4H-SiC fabricated by a femtosecond laser. **Nanotechnology and Precision Engineering**, v. 3, n. 4, p. 218-228, 2020. DOI: https://doi.org/10.1016/j.npe.2020.11.003.

232

PG87

Interação de plasmons-polaritons de superfície com pontos quânticos semicondutores

LEMES, M. F. S.[1]; MAREGA JUNIOR, E.[1]

matheus.lemes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A proposta para o programa de mestrado tem como objetivo estudar a interação de excitações excitônicas presentes em pontos quânticos (QD) únicos de InAs/GaAs com plasmon-polaritons de superfície (SPP) gerados em uma fina camada de ouro, visto que esse regime de interação apresenta diversas aplicações no âmbito da óptica quântica e informação quântica. (1-2) Os QDs serão produzidos pela técnica de epitaxia de feixes moleculares (MBE) e as nanoestruturas metálicas serão crescidas sobre a matriz de GaAs que cobre os QDs usando uma câmara de evaporação. A análise da interação exciton-plasmon será feita empregando medidas de micro-fotoluminescência à baixa temperatura. Não se pretende obter com esta proposta regimes de forte acoplamento, mas sim mostrar em um sistema simples que um campo plasmônico pode modificar a emissão de um ponto quântico único. Em suma, o objetivo final deste projeto é localizar os pontos quânticos numa amostra de baixa densidade e fabricar estruturas metálicas, com geometrias que contemplem a formação de "quinas"onde o campo elétrico possa ser confinado e verificar a sua influência nas características da emissão excitônica, como a taxa de emissão e a largura de linha.

Palavras-chave: Pontos quânticos. Semicondutores. Plasmon polaritons de superfície.

Referências:

1 COHEN-HOSHEN, E. *et al*. Exciton–plasmon interactions in quantum dot-gold nanoparticle structures. **Nano Letters**, v. 12, n. 8, p. 4260-4264, 2012.
2 BITTON, O.; GUPTA, S. N.; HARAN, G. Quantum dot plasmonics: from weak to strong coupling, **Nanophotonics**, v. 8, n. 4, p. 559-575, 2019.

233

PG88
Condensado de Bose-Einstein dipolar numa armadilha bolha

DINIZ, P.[1]; HENN, E.[1]
pedro.diniz@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho consiste na investigação do estado fundamental de um condensado de Bose-Einstein dipolar aprisionado em uma armadilha tipo-bolha sintonizável, isto é, uma armadilha que pode ser continuamente deformada desde uma armadilha harmônica até uma armadilha com formato de casca esférica. Investigamos o sistema na aproximação de Thomas-Fermi, regime no qual a energia cinética do sistema é desprezível em comparação com as outras componentes energéticas, interação e aprisionamento. Atualmente condensados de Bose-Einstein não dipolares aprisionados em armadilhas do tipo bolha, seja na casca fina e/ou na tradição sintonizáveis (1) foram razoavelmente bem estudados tanto de um ponto de vista teórico como experimental. Já condensados compostos por espécies atômicas altamente dipolares ainda não receberam tanta atenção. Há pouco tempo, nós obtivemos o estado fundamental e a frequência de alguns modos coletivos de oscilação para um condensado dipolar em forma de casca esférica no limite de casca fina. (2) Dentre os resultados, foi demonstrado que nessa situação a interação de dipolo-dipolo produz deformações geométricas/topológicas na nuvem atômica. Especificamente, vimos que quanto mais forte for a interação dipolar, mais os átomos tendem a se concentrar no equador da região esférica delimitada pela armadilha. Por outro lado, um resultado bem conhecido é o de que condensados dipolares produzidos por armadilhas harmônicas tendem a se alongar na direção de polarização, um efeito que de certa forma se opõe ao que ocorre no caso da casca fina. Isto posto, desejamos investigar o que ocorre na situação intermediária, isto é, num regime de "casca grossa". Esperamos observar o resultado da ação combinada dos dois efeitos: o de concentração de densidade no equador versus o alongamento na direção de polarização. Também estamos interessados em observar a interação entre as duas transições topológicas diferentes que ocorrem: uma devido à transição da geometria harmônica até a de casca e a outra devido ao acúmulo de densidade no equador. Além disso, temos como próximo passo a introdução de efeitos de flutuações quânticas no sistema com o intuito de investigar a possível formação de gotículas auto-aprisionadas.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Armadilha tipo-bolha. Interação dipolo-dipolo.

Referências:

1 SUN, K. *et al.* Static and dynamic properties of shell-shaped condensates. **Physical Review A**, v. 98, n. 1, p. 013609-1-013609-24, 2018.
2 DINIZ, P. C. *et al.* Ground state and collective excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap. **Scientific Reports**, v. 10, p. 4831-1-4831-10, 2020. DOI 10.1038/s41598-020-61657-0.

PG89

Photon-mitochondria interaction and the effects on quantum regimes

PEREZ, A. S.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; INADA, N. M.[1]; MEZZACAPPO, N. F.[1]; VERCESI, A. E.[2]; CASTILHO, R. F.[2]

alinesp.usp@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Faculdade de Ciências Médicas - UNICAMP

Photodynamic therapy (PDT) has been widely used and its an approved photo- activated and non-invasive medical technique for treatment of several diseases, including different cancer types, obesity and infections. It involves administration of a photosensitizing agent which is activated by a specific wavelength. Its results in a sequence of chemical and biological processes that generates reactive oxygen species (ROS), the excesses of this species leads to an irreversible sick cells photodamage. Mitochondria are among the targets of photodamage, it is believed that once mitochondrial membrane permeability is affected by radiation it leads to cell apoptosis. (1) Mitochondria are membrane-bound organelles primary responsible for the production of adenosine triphosphate (ATP), due the high-energy in the phosphate bond it provides energy for innumerable reactions within the cell. Differently of other intracellular organelles, mitochondria have two distinct membranes and they own genome. These organelle structures are variable depending on the cell type, in general can assume spherical and elongated shapes. In multicellular organisms, mitochondria can have variable morphologies once different tissues have distinct energy needs. (2) Despite reported demonstrations in cell and tissues the mechanism which involve mitochondria-electromagnetic radiation interaction in phototherapy is still poorly understood. Evidence of the importance of the mitochondria in the cell death due PDT has been reported, however the conclusions around the death process remain controversial. Our purpose is investigating the response of mitochondria-photon interaction and its quantum effects. Isolated mitochondria from rat liver using the differential centrifugation technique (3), will be lighted with different wavelengths in biological condition, the mitochondria respiration will be controlled using Oroboros® equipment. Furthermore, Raman spectroscopy measurements are going to be used to obtain chemical and structural information that helps to understand the possible mitochondria structure changes. Finally, we are going to associate ultrasound, ultraviolet light, x-ray and microwave to investigate the response of mitochondria to these radiations.

Palavras-chave: Mitochondria. Quantum effects

Referências:

1 GREEN, D. R.; REED, J. C.Mitochondria and apoptosis. **Science**, v. 281, n. 5381, p. 1309-1312, 1998.

2 SCHEFFLER, I. E. Conditional lethal mutants of Chinese hamster cells: mutants requiring exogenous carbondioxide for growth. **Journal of Cellular Physiology**, v. 83, n. 2, p. 219-230, 1974.

3 INADA, N. M. M. **Ação fotodinâmica de meso-porfirinas sobre função mitocondrial e viabilidade de células LNCaP**. 2006. 168 p. Tese (Doutorado em Fisiopatologia Médica) - Faculdade de Ciências Médicas, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.

PG90

Diagnóstico precoce e não invasivo de tumor usando nanossensores de atividade proteolítica

SILVA, E.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]

erica.corina@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer é uma doença silenciosa com sintomas que podem ser facilmente confundidos com os de outras doenças e o diagnóstico preciso, precoce e efetivo é o fator determinante da cura. (1) Biomarcadores endógenos com baixo poder preditivo, exames de imagem sem resolução espacial necessária e fatores socioeconômicos contribuem para taxas modestas de detecção precoce do tumor de fígado quando o tratamento apresenta a melhor resposta clínica. (1-2) Uma alternativa de diagnóstico precoce é o uso de nanomateriais sensíveis a propriedades intrínsecas do microambiente do tumor (baixo pH e pressão parcial de oxigênio, e alta expressão catalítica de metaloproteinases de matriz extracelular) como agentes pró-diagnóstico. Como exemplo, nanossensores de ativação catalítica de metaloproteinases de matriz celular externa específicas do microambiente do tumor que liberam fragmentos de peptídeos os quais se acumulam na urina, sendo a concentração o sinal da presença do tumor. (3) Nanossensores com a ativação catalítica comprovada in vitro e um modelo farmacocinético multicompartimental ajudarão a definir estratégias para integrar o nanossensor a um teste imunocromatográfico e validar uma plataforma de diagnóstico preciso, precoce e com baixo custo do câncer hepático. Se essa plataforma for bem-sucedida, ela poderá ser rotineiramente utilizada pelo sistema público de saúde para rastrear a doença e monitorar pacientes, e também ser adaptada para o diagnóstico de outras enfermidades nas quais proteases estão envolvidas no desenvolvimento da patologia.

Palavras-chave: Nanomedicina. Tumor. Microambiente. Nanossensor. Diagnóstico.

Referências:

1 ETZIONI, R. *et al.* The case for early detection. **Nature Reviews Cancer**, v. 3, n. 4, p. 343-352, 2003.

2 HORI, S. S.; GAMBHIR, S. S. Mathematical model identifies blood biomarker–based early cancer detection strategies and limitations. **Science Translational Medicine**, v. 3, n. 109, p. 109ra116-1-109ra116-9, 2011.

3 KWON, E. J.; DUDANI, J. S.; BHATIA, S. N. Ultrasensitive tumour-penetrating nanosensors of protease activity. **Nature Biomedical Engineering**, v. 1, n. 4, p. 0054-1-0054-10, 2017.

236

PG91

Produção recombinante e caracterização bioquímica de uma celobiose desidrogenasa (CDH) de Thermothelomyces thermophilus M77

SAMANIEGO, L. V. B.[1]; ARNOLDI, V.[1]; POLIKARPOV, I.[1]

lbautista@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A enzima celobiose desidrogenase, CDH, (EC1.1.99.18) é um flavocitocromo extracelular secretado por fungos degradadores de madeira como o ascomiceto *Thermothelomyces thermophilus*. A CDH tem uma estrutura de dois domínios, sendo porção citocromo (domínio Cyt) e uma seção de flavodehidrogenase oxidante de açúcares (domínio DH). O domínio DH catalisa a oxidação 2e-/2H+ do átomo de carbono anomérico (C1) do dissacarídeo celobiose para a celobiono-δ-lactona. (1) Em seguida, ocorre uma transferência de elétrons interdomínio (IET) do o FAD reduzido do domínio DH para o grupo heme b do domínio Cyt, seguida pela transferência de elétrons (ET) de Cyt para aceptores de elétrons externos como as mono oxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs). (2) Essas características funcionais tornam a CDH uma enzima capaz de realizar uma diversidade de tarefas biotecnológicas. A necessidade de produzir grandes quantidades dessa enzima de alto peso molecular e de múltiplos domínios, para realizar caracterizações bioquímicas e estruturais, nos leva a procurar um sistema de expressão que satisfaça nossos requisitos. Desta forma, inicialmente escolhemos *Pichia pastoris* por possuir algumas vantagens como elevada produção de biomassa, promotores fortes e sinais eficientes de secreção de proteínas. Com procedimentos fáceis de purificação, a *P. pastoris* torna-se um sistema de alto rendimento bastante atrativo. (3) Obtivemos então através um colaborador de nosso grupo, uma cepa de *P. pastoris* com o gene CDH de *T. thermophilus* (número de acesso: XM_003663334.1) integrado satisfatoriamente ao seu genoma. A partir daí, foi realizado um pré inóculo de *P. pastoris* em meio tamponado complexo contendo glicerol (BMGY) até atingir DO600 de 4,0. Em seguida, o inóculo foi realizado em meio tamponado complexo contendo metanol (BMMY) e adicionamos metanol 100% a uma concentração final de 0,75% a cada 24 horas para manter a indução. Após 120 h, coletamos o sobrenadante e passamos por uma coluna IMAC para recuperar a CHD marcada com His6x, e posteriormente o clivamos com TEV-protease, obtendo uma enzima CDH funcional. Em seguida, testamos a atividade enzimática, empregando celobiose e lactose como substratos e mensurando a redução de 2,6-diclorofenolindofenol (DCPIP). Além disso, medimos a produção de peróxido de hidrogênio usando uma reação com o reagente Amplex® Red e peroxidase de rábano (HRP). Obtivemos resultados preliminares, com pH e temperatura ótimos de 6 e 60 ° C, respectivamente, com preferência pela lactose em relação à celobiose como substrato. Nossas perspectivas são de usar esta enzima versátil em aplicações biotecnológicas que vão de redutases de LMPOs a agentes antimicrobianos e antibiofilmes.

Palavras-chave: Oxienzimas. Celobiose desidrogenase. *Pichia pastoris*.

Referências:

1 SCHEIBLBRANDNER, S.; LUDWIG, R. Cellobiose dehydrogenase: bioelectrochemical insights and applications. **Bioelectrochemistry**, v. 131, p. 107345-1-107345-22, 2020. DOI: https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2019.107345.

2 TAN, T.-C. *et al*. Structural basis for cellobiose dehydrogenase action during oxidative cellulose degradation. **Nature Communications**, v. 6, p. 7542-1-7542-11, 2015. DOI: https://doi.org/10.1038/ncomms8542.
3 KARBALAEI, M. *et al*. *Pichia pastoris*: a highly successful expression system for optimal synthesis of heterologous proteins. **Journal of Cellular Physiology**, v. 235, n. 9, p. 5867-5881, 2020. DOI: https://doi.org/10.1002/jcp.29583.

238

PG92
Ativação de LPMO em sistema com aril-álcool oxidase

HIGASI, P. M. R.[1]; POLIKARPOV, I.[1]
paulahigasi@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Mono-oxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs) são enzimas dependentes de cobre que quebram cadeias de carboidratos através da inserção de oxigênio no carbono C1 ou no carbono C4 de um dos monômeros da cadeia. A atividade das LPMOs depende da redução do cobre, de Cu(II) para Cu(I). Este cobre catalítico pode ser reduzido de diversas maneiras, incluindo grande variedade de pequenas moléculas, produtos de degradação da lignina, e outras oxidoredutases. (1) Além disso, estudos publicados nos últimos anos indicam que a origem do oxigênio inserido é H2O2, e não O2, como pensava-se inicialmente. (2) Aril-álcool oxidases (AAOs) são enzimas que catalisam a conversão de álcoois aromáticos em aldeídos aromáticos, com concomitante geração de H2O2 como subproduto. Até o momento, um pequeno número de outras enzimas foi utilizado na ativação de LPMOs (3), e ainda não foi demonstrado que AAOs colaboram com as reações de LPMOs. Neste estudo ativamos uma TtLPMO9H com MtAAOx, e seu substrato, álcool veratrílico. Descobrimos que o álcool veratrílico foi usado como um mediador de elétrons para a redução de TtLPMO9H, mas por si só não resultava na atividade da LPMO. Também descobrimos que enquanto a formação de produtos oxidados era dependente de MtAAOx, a dependência não era da transferência direta de elétrons entre as enzimas, mas do H2O2 produzido pela oxidase. Além disso, mostramos que esta produção in situ de H2O2 resultou em reações mais lentas, em comparação com as condições de reação LPMO padrão (com ácido ascórbico), mas evitou a inativação precoce do LPMO e foi benéfica para intervalos de tempo mais longos. Esses resultados indicam que H2O2 é de fato o co-substrato de TtLPMO9H, e que uma variedade ainda maior de moléculas pode ser usada como redutoras do que se pensava anteriormente, e que outras oxidoredutases produzidas por organismos degradadores da parede celular podem participar de reações de LPMO como geradores de H2O2.

Palavras-chave: Mono-oxigenases líticas de polissacarídeos. Aril-álcool oxidase. Atividade auxiliar.

Referências:

1 FROMMHAGEN, M. *et al.* Distinct substrate specificities and electron-donating systems of fungal lytic polysaccharide monooxygenases. **Frontiers in Microbiology**, v. 9, p. 1080-1-1080-22, May 2018. DOI 10.3389/fmicb.2018.01080.
2 BISSARO, B. *et al.* Oxidative cleavage of polysaccharides by monocopper enzymes depends on H2O2. **Nature Chemical Biology**, v. 13, n. 10, p. 1123-1128, Oct. 2017.
3 GARAJOVA, S. *et al.* Single-domain flavoenzymes trigger lytic polysaccharide monooxygenases for oxidative degradation of cellulose. **Scientific Reports**, v. 6, p. 28276-1-28276-9, 2016. DOI 10.1038/srep28276.

239

PG93
Coherent light-matter interaction in dense atomic clouds

FERNANDEZ, M. F.[1]; MAGNANI, P. H. N.[2]; DIAS, P. G. S.[2]; TEIXEIRA, R. C.[2]; COURTEILLE, P. W.[1]

mfrometa93@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

The main objective of this research is to study a particular case of the light-matter interaction: light diffusion in dense samples. In dense clouds, short-range atomic interactions cannot be neglected and in these systems we can observe the emergence of collective effects such as sub or super radiance. (1) In this work an experimental arrangement is proposed to obtain a dense cloud of ^{88}Sr and then study collective effects in that ensemble of atoms. The first experiments to be carried out consist in measuring the coherent transmission of a low intensity beam by the cloud. (2) For this, we will use an incident light close to the resonance with a $J = 0 \leftrightarrow J = 1$ ^{88}Sr transition. Once experimentally detected the coherent optical response of the dense cloud, we will make a comparison of the results with what it is expected by the theory based on the Coupled-Dipole Model. (3)

Palavras-chave: Dense regime. Optical dipole trap. Coupled dipole model.

Referências:

1 ARAÚJO, M. O. *et al.* Superradiance in a large and dilute cloud of cold atoms in the linear-optics regime. **Physical Review Letters**, v. 117, n. 7, p. 073002-1-073002-6, 2016.
2 JENNEWEIN, S. *et al.* Coherent scattering of near-resonant light by a dense, microscopic cloud of cold two-level atoms: experiment versus theory. **Physical Review A**, v. 97, n. 5, p. 053816-1-053816-5, 2018.
3 COURTEILLE, P. W. *et al.* Modification of radiation pressure due to cooperative scattering of light. **European Physical Journal D**, v. 58, n. 1, p. 69-73, 2010.

240

PG94

Real-space formulation of the numerical renormalization-group method (NRG)

FERRARI, A. L.[1]; OLIVEIRA, L. N.[1]

analuizarfferrari@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

We present an alternative formulation of the numerical-renormalization group method (NRG). (1) Instead of logarithmically discretizing the conduction band, we start out with the impurity coupled to a tight-binding Hamiltonian and define a basis associated with an exponential sequence in real space. The renormalization-group result is equivalent to Wilson's transformation. The new procedure is significantly simpler and more general than the original formulation. As an illustrative application, we have computed the transport properties for the Anderson model of the side-coupled device (SCD), a quantum wire laterally coupled to a quantum dot. To mimic experimental conditions, a gate potential controls the electronic occupation of the dot. We have computed the zero-bias electrical and thermal conductances, and thermopower as functions of the temperature and gate potential. In the Kondo regime, previous studies (2) have shown the thermal dependence of the electrical conductance to map linearly onto a universal function of the temperature scaled by the Kondo temperature. We have extended the analysis to the other two transport properties.

Palavras-chave: Side coupled device. NRG. Universality.

Referências:

1 KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. i. static properties for the symmetric case. **Physical Review B**, v. 21, n. 3, p. 1003-1043, 1980.

2 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, 2009.

PG95

Descoberta de novos derivados benzoimidazólicos como candidatos a compostos líderes para a Malária

BARBOSA, C. S.[1]; GUIDO, R. V. C.[1]; AGUIAR, A. C. C.[2]; CRUZ, M. D.; DIAS, L. C.[3]

camilasbarbosa@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]UNIFESP

[3]Instituto de Química - Unicamp

A malária é uma doença que ainda atinge milhões de pessoas anualmente. Em 2019, a Organização Mundial da Saúde (OMS) reportou a ocorrência de 229 milhões de novos casos de malária, enquanto o número estimado de mortes foi de 409 mil em 87 países com malária endêmica. Na região das Américas, a OMS reportou a ocorrência de 889 mil casos (0.4% do total). Sendo que, Brasil, Colômbia e Venezuela representam 86% de todos os casos nessa região.(1) Apesar de todo o progresso alcançado com a diminuição no número de novos casos e no número de mortes nos últimos anos, a doença continua a ser um grave problema de saúde pública em muitos países. A presença dessa doença agrava ainda mais a situação de países pobres, uma vez que foi verificado menor crescimento econômico nos países com alta taxa de transmissão. Associado a isso, o controle, o tratamento e a prevenção impõe altos custos tanto para os indivíduos, quanto para os governos. Outro agravante para essa situação é o surgimento e a disseminação de cepas resistentes de parasitos e vetores ao tratamento e aos inseticidas disponíveis, respectivamente. Portanto, o impacto na economia associado ao surgimento e disseminação de resistência, refletem a importância na continuidade de investimentos e pesquisas, principalmente na busca de novos medicamentos contra a malária. O screening fenotípico de coleções de compostos é uma alternativa atrativa para a descoberta de moléculas com novos mecanismos de ação. A promissora atividade antiplasmodial de derivados benzoimidazólicos tem sido reportada na literatura.(2-3) Este trabalho teve como objetivo determinar o perfil da atividade antiplasmodial de novos derivados benzoimidazólicos com substituintes nas posições 3, 5 e 6 do anel heterocíclico. No total, 20 compostos foram sintetizados e tiveram a atividade inibitória do crescimento de Plasmodium falciparum e citotoxicidade determinadas em ensaios padronizados. Os valores de potência variaram entre 0.095 e 18 μM e citotoxicidade entre 6 e >58 μM. Os índices de seletividade (IS, razão entre a citotoxicidade e atividade antiplasmodial variaram entre >1 e 116. Os dois inibidores mais potentes e seletivos foram selecionados como compostos representativos da série para a determinação do perfil da atividade antiplasmodial dessa classe de compostos. Para isso, será realizado: i. determinação da potência frente a um painel de cepas resistentes do P. falciparum; ii. avaliação do perfil combinatório de atividade com o artesunato (fármaco padrão para o tratamento da malária); e iii. investigação do mecanismo de ação através da inibição de polimerização da hemozoína e inibição da via de isoprenóides.

Palavras-chave: Benzoimidazois. Malária. Perfil de atividade.

Referências:

1 WORLD MALARIA REPORT 2020: 20 years of global progress and challenges. Geneva: World Health Organization; 2020. License: CC BY-NC-SA 3.0 IGO. 2 RAMACHANDRAM. S. *et al.* N-aryl-2-aminobenzoimidazoles: novel, efficatious, antimalrial lead compounds. **Journal Medicinal Chemis-**

try,v..57, n.15,p.6642-6652,2014. 3 HAMEED,P, S. *et al*. Aminobenzoimidazoles, a novel class of orally active antimalarial agents. **Journal Medicinal Chemistry,**v.57, n.13,p.5702-5713,2014.

243

PG96
Universal time evolution of a turbulent superfluid Bose gas

OROZCO, A. D. G.[1]; MADEIRA, L.[1]; MORENO, M.[1]; FRITSCH, A.[2]; TAVARES, P. E.[3]; CASTILHO, P. C. M.[1]; CIDRIM, A.[4]; ROATI, G.[5]; BAGNATO, V. S.[1]

arnolgarcia@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]National Institue Standard Technology - University of Maryland

[3]Departamento de Fisca - UFMG

[4]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[5]European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy - LENS

We study the emergence of universal scaling in the time-evolving momentum distribution of a harmonically trapped three-dimensional Bose-Einstein condensate, parametrically driven to a quantum turbulent state. We demonstrate that the out-of-equilibrium dynamics post excitation is described by a single function due to nearby non-thermal fixed points.9.(1-2)The observed behavior connects the dynamics of a quantum turbulent state to several far-from-equilibrium phenomena. We present a controllable protocol to explore universality in such systems, obtaining scaling exponents which can serve as reference for future theoretical investigations.(3) Our experimental results thus offer a promising route to investigate the complex dynamics of the quantum turbulence regime under a novel perspective.

Palavras-chave: Bose-Einstein condensate . Quantum turbulence .Far-for-equilibrium.

Referências:

1 PRÜFER, M. *et al.* Observation of universal dynamics in a spinor Bose gas far from equilibrium. **Nature**, v. 563, n. 7730, p. 217–220, 2018.
2 ERNE, S. *et al.* Universal dynamics in an isolated one-dimensional Bose gas far from equilibrium. **Nature**, v. 563, n. 7730, p. 225–229, 2018.
3 SCHMIED, C.-M.; MIKHEEV, A. N.; GASENZER, T. Prescaling in a far-from-equilibrium Bose gas. **Physical Review Letters**, v. 122, n.17,p. 170404, 2019.

PG97
Determinação precisa do acoplamento forte

RODRIGUES, M. V.[1]; BOITO, D.[1]

marcus.gonzalez.rodrigues@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Na ausência de observação direta de nova física no Large Hadron Collider (LHC) extrações com alta precisão de parâmetros livres do Modelo Padrão se torna uma das tarefas cada vez mais necessárias para a busca por fenômenos Além do Modelo Padrão. No que rege o setor das interações fortes, descrito pela Cromodinâmica Quântica (QCD), tanto o acoplamento forte — análogo à constante de estrutura fina da eletrodinâmica — quanto a massa dos quarks são parâmetros livres que devem ser extraídos a partir de análises estatísticas rigorosas confrontando cálculos teóricos no estado da arte e experimento. Neste trabalho (1) nós implementamos o algoritmo de combinação de dados utilizado em (2) no contexto de determinações do momento magnético anômalo do múon (g-2) para combinar as distribuições espectrais de $\tau \to \pi^-\pi^0\nu_\tau$, $\tau \to 2\pi^-\pi^+\pi^0\nu_\tau$ e $\tau \to \pi^-3\pi^0\nu_\tau$ medidos pelas colaborações ALEPH e OPAL. Adicionando essa combinação com os resultados medidos pela colaboração BABAR para a distribuição $\tau \to K^-K^0\nu_\tau$ e com estimativas de outras contribuições residuais para o decaimento do τ em hádrons utilizando CVC e dados de $e^+e^- \to \mathrm{hdrons}$ obtivemos uma nova e mais precisa função espectral vetorial e iso-vetorial do τ. Utilizando essa nova função espectral e regras de soma a energia-finita determinamos com alta precisão o acoplamento forte em baixas energias, resultando em um valor de $\alpha_s(m_Z) = 0.1171 \pm 0.0010$ na escala da massa do bóson Z.

Palavras-chave: Fisica de partículas. Cromodinâmica quântica. Quarks

Referências:

1 BOITO, D. *et al.*, Strong coupling from an improved τ vector isovector spectral function, **Physical. Review D**, v 103, n. 3, p.034028,2021.
2 KESHAVARJ, A.; NOMURA, D.;TEUBNER, T. Muon $g-2$ and $\alpha(M_Z^2)$: a new data-based analysis, **Physical Review D**, v. 97,n.11, p.114025,2018.

PG98

Structure and functioning of neural networks: the complex network properties of artificial neurons

SCABINI, L.[1]; BRUNO, O. M.[1]

leonardo.f.scabini@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Artificial Neural Networks (ANN) are in a non-stopping ascension since the introduction of deep learning and the big data phenomenon, i.e., the growing capacity to collect data. Increasingly deeper and more complex ANNs are being built and achieving impressive practical results in several fields. However, this phenomenon also leads to black-box approaches becoming usual in many applications, as little is known regarding these network's internal functioning. Although these systems can be formalized within statistical mechanics, their emergent dynamics cannot be solved analytically. It is challenging to derive their collective behavior from a knowledge of its neurons, and they are also sensitive to input perturbations (1), a classic characteristic of complex systems. On the other hand, in the past decades, the Complex Network (CN) research has gained strength, which focuses on understanding such systems. CN usually represents real-world phenomena composed of a wide range of elements and interactions, hard to analyze with classical approaches. These properties align with modern ANNs, consisting of large amounts of neurons and synapses with signs of a complex topological organization. It is possible to observe a high correlation between both systems (CNs and ANNs), which is still underexplored. Therefore, this correlation links the present research's proposed ideas. Here we employ CNs for understating the structure and functioning of fully-connected ANNs on vision tasks. We propose a dataset with 124 thousand neural networks to study how they behave under different scenarios. They are employed in a supervised classification setup, using typical construction and training techniques, and considering four vision benchmarks. Each neural network is then approached as a weighted and undirected graph, and centrality measures are computed from its hidden neurons. A high correlation is found between these measures and the network's classification performance. We also propose a new concept of bag-of-neurons (BON), built by grouping neurons with similar local CN characteristics. Six neuron types usually occur in our neural network population, and they share similar properties across different tasks. It is also possible to identify how they are distributed between models with varying classification accuracy. These results suggest the existence of global CN properties governing fully-connected neural network functioning and performance. We are now addressing these properties dynamically (during training) for understanding how they emerge from an initially random neural network. We also explore these concepts for the proposal of new integrative pattern recognition models. A new computer vision method was proposed combining CNs and randomized neural network principles, achieving exceptional performance in different applications such as texture analysis (2) and diagnosis of COVID-19. (3)

Palavras-chave: Neural networks. Complex networks. Computer vision.

Referências:

1 GOODFELLOW, I. J.; SHLENS, J.; SZEGEDY, C. **Explaining and harnessing adversarial examples**. 2014. Disponível em: https://arxiv.org/abs/1412.6572v1. Acesso em: 17 jun. 2021.
2 RIBAS, L. C. *et al.* **Learning local complex features using randomized neural networks for texture analysis**. 2020. Disponível em: https://arxiv.org/abs/2007.05643. Acesso em: 17 jun. 2021.

3 SOARES, J. C. *et al*. Detection of a SARS-CoV-2 sequence with genosensors using data analysis based on information visualization and machine learning techniques. **Materials Chemistry Frontiers**, v.5,p.5658-5670,2021.DOI 10.26434/chemrxiv.13366379.v1.

247

PG99

Lipopeptídeo produzido por uma linhagem termohalofílica de Bacillus alveayuensis isolada de rocha reservatório de petróleo: avaliação da atividade antimicrobiana e da capacidade de recuperação de óleo em meio poroso

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

marcela.argentin@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes são moléculas provenientes de metabolismo secundário microbiano formadas por um domínio hidrofóbico e um domínio hidrofílico. Sua natureza anfipática faz com que estas moléculas sejam capazes de reduzir a tensão superficial e interfacial entre fases não miscíveis, possuindo assim, uma ampla gama de aplicações industriais e ambientais. (1) Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivos verificar a capacidade de recuperação de óleo residual em meio poroso não consolidado, bem como, a atividade antimicrobiana do biossurfactante (BS) produzido pela linhagem termohalofílica *B. alveayuensis* isolada de amostra rochosa proveniente de reservatório profundo da Bacia de Campos (RJ). O BS foi produzido a partir do cultivo do microrganismo em Meio Mineral contendo glicerol e NH4NO3, com salinidade de 70 g/L de NaCl, sem agitação e à temperatura de 55 ºC. Após seis dias de incubação, o BS bruto foi obtido a partir de precipitação ácida (HCl 6M) com rendimento de 0,27 g/L, e sua atividade foi determinada pelo índice de emulsificação (E24) e pelas medidas de tensões superficiais e interfaciais. A extração do BS foi realizada com clorofórmio seguida de semi-purificação em coluna de sílica gel 60. A atividade antimicrobiana foi determinada através do método de disco difusão e da microdiluição em placa (2) contra as linhagens *Bacillus subtilis* (ATCC 6633 e 21332), *Escherichia coli* (ATCC 25922), *Pseudomonas fluorescens* (ATCC 13525) e *Staphylococcus epidermidis* (ATCC 12228 e 35984). Os ensaios por disco difusão mostraram discreta inibição contra as linhagens *B. subtilis* (ATCC 21332), *P. fluorescens* (ATCC 13525) e *S. epidermidis* (ATCC 35984). Já os testes de microdiluição mostraram que, na presença do biossurfactante, houve uma inibição inicial no crescimento de todos os microrganismos analisados, se comparados ao controle. A capacidade de recuperação de óleo em meio poroso foi avaliada pelo método de lavagem de areia. (3) A areia contaminada foi preparada a partir da mistura de 360 g de areia peneirada (0,3 a 0,6 mm) e 72 mL de óleo de motor (10w40). Após 90 dias, uma alíquota de 15 g da areia contaminada foi transferida para um béquer juntamente com 30 mL de solução teste. As soluções utilizadas foram BSBASP60 (0,1%), salmoura (NaCl 5%) e tergitol (100 ppm, 0,1%, 0,5%, 1% e 2%). Os frascos foram incubados por 24h, a fase aquosa foi removida e o óleo residual ainda presente na areia foi extraído com clorofórmio. O biossurfactante, em solução a 0,1%, foi capaz de retirar 29,6($\pm$3,04)% do óleo presente no meio poroso. A remoção obtida com o tergitol a 2%, foi de 40,5($\pm$0,7)% e, com a salmoura (NaCl a 5%), 2,4($\pm$0,3)%. Embora a eficácia do tergitol tenha sido, aproximadamente, 10% acima da eficácia observada no biossurfactante, foi necessária uma concentração 20 vezes maior de tergitol para realizar uma extração similar ao BS. O biossurfactante produzido pela linhagem estudada mostrou uma potencial aplicação em processos de MEOR. Quanto à ação antimicrobiana, o BS deve ser testado em sua forma mais pura para confirmar a inibição parcial ou total no crescimento das bactérias testadas.

Palavras-chave: Bioemulsificante. MEOR. *Bacillus alveayuensis*.

Referências:

1 ZANOTTO, A. W.; VALÉRIO, A.; ANDRADE, C. J.; PASTORE, G. M. New sustainable alternatives to reduce the production costs for surfactin 50 years after the discovery. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 103, n. 21-22, p. 8647-8656, 2019.
2 CLINICAL AND LABORATORY STANDARDS INSTITUTE. **Methods for antimicrobial dilution and disk susceptibility testing of infrequently isolated or fastidious bacteria**. 3rd ed. Wayne, PA: CLSI, 2016. (CLSI guideline M45).
3 URUM, K.; PEKDEMIR, T.; ÇOPUR, M. Surfactant treatment of crude oil contaminated soils. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 276, n. 2, p. 456-464, 2004.

249

PG100

Redundant information storage and non-Markovianity in the central spin model

MARTINS, W.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]

wilson.santana.martins@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

In the present work, we use the central spin model - here, a spin coupled to a bath with ferromagnetic interactions of the Ising type and magnetic field - to probe the transition from Markovian to non-Markovian dynamics, seeking to investigate how this suppresses the printing of redundant information in the environment, which gives rise to the phenomenon of quantum Darwinism. (1) We also analyze how this phenomenon is related to quantifiers of information irreversibility and decoherence, such as the Loschmidt echo which, in turn, corresponds one to one with thermodynamic indicators (2), the Lee-Yang zeros, from another context. As shown in the literature, there are also direct relationships between quantum Darwinism and decoherence. (3) Thus, the objective is to obtain a global view of the problem, and relate how the different descriptions, with their respective observables, can provide indicators for phenomena from different contexts - even in situations where direct experimental measurements are not possible, as is the case with Lee-Yang zeros, for example.

Palavras-chave: Non-Markovianity. Redundancy. Quantum Darwinism.

Referências:

1 GALVE, F.; ZAMBRINI, R.; MANISCALCO, S. Non-Markovianity hinders quantum Darwinism. **Scientific Reports**, v. 6, p. 19607-1-19607-7, 2016. DOI 10.1038/srep19607.
2 WEI, B.-B.; LIU, R.-B. Lee-Yang zeros and critical times in decoherence of a probe spin coupled to a bath. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 18, p. 185701-1-185701-5, 2012. DOI 10.1103/PhysRevLett.109.185701.
3 RIEDEL, C. J.; ZUREK, W. H.; ZWOLAK, M. The rise and fall of redundancy in decoherence and quantum Darwinism. **New Journal of Physics**, v. 14, n. 8, p. 083010-1-083010-20, 2012. DOI 10.1088/1367-2630/15/3/03950.

250

PG101

Toward lossless infrared optical trapping of small nanoparticles using nonradiative anapole modes

SARRIA, J. J. H.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[1]; SALAZAR, J. R. M.[2]

jhon.hernandez@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto Nacional de Telecomunicações - INATEL

A major challenge in plasmonic trapping of small nanoparticles is the considerable heating due to the Joule effect of metallic components. (1) This heating can be avoided with electromagnetic field confinement in high-refractive-index materials, but nanoparticle trapping is difficult because the electromagnetic fields are mostly confined inside the dielectric nanostructures. Herein, we present the design of an all-dielectric platform to capture small dielectric nanoparticles without heating the nanostructure. It consists of a Si nanodisk engineered to exhibit the second-order anapole mode at the infrared regime (2), where Si has negligible losses, with a small slot at the center. A strong electromagnetic hotspot is created, thus allowing to capture nanoparticles as small as 20 nm. The numerical calculations indicate that optical trapping in these all-dielectric nanostructures only occurs without heating in the infrared, since for visible wavelengths the heating levels are similar to those in plasmonic nanostructures.

Palavras-chave: Plasmonic trapping. High-refractive-index materials. Electromagnetic hotspot.

Referências:

1 BAFFOU, G.; QUIDANT, R. Thermo-plasmonics: using metallic nanostructures as nano-sources of heat. **Laser and Photonics Review**, v. 7, n. 2, p. 171-187, 2013.
2 LIU, S.-D. *et al.* High Q-factor with the excitation of anapole modes in dielectric split nanodisk arrays. **Optics Express**, v. 25, n. 19, p. 22375-22387, 2017.

PG102

Resolvendo charadas cripto-aritméticas com algoritmos bio e sócio-inspirados

REIS, L. A.[1]; FONTANARI, J. F.[1]

lucas.antunes.reis@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Algoritmos de busca que imitam processos encontrados na natureza como o comportamento de forrageio de animais e a evolução pela seleção natural são ditos algoritmos bio-inspirados e prometem encontrar soluções ótimas ou quase-ótimas de problemas de otimização sem utilizar praticamente nenhuma informação acerca desses problemas. Outra classe de algoritmo de busca de propósito geral é a dos algoritmos sócio-inspirados que, como o nome indica, imitam processos sociais ou culturais. Esses algoritmos são bem menos populares que os bio-inspirados, o que é um tanto paradoxal, já que o modo como humanos solucionam problemas difíceis é exatamente através da colaboração em forças-tarefas e, portanto, algoritmos que imitam a forma como interagimos deveriam ser tão ou mais eficientes e populares quanto os algoritmos bio-inspirados. Nossa proposta de dissertação é estudar desempenho de um algoritmo baseado na interação social, o aprendizado por imitação (1), e de dois tipos de algoritmos evolucionários, o algoritmo genético sexuado e o assexuado (2), na busca de soluções de charadas cripto-aritméticas. Uma charada cripto-aritmética é uma operação algébrica (adição, por exemplo) em que os dígitos dos números são representados por letras, de modo que cada letra representa um dígito único, e o objetivo é encontrar a correspondência dígito-letra que torna a operação soma válida pelas regras da aritmética. (3) A eficiência desses algoritmos será medida pelo tempo, dado pelo número de atualizações, que o grupo de agentes leva para encontrar a solução da charada. Esse tempo é medido em relação ao tempo que o algoritmo de busca cega, no qual o espaço de soluções é explorado de forma completamente aleatória , leva para encontrar a solução. Vamos considerar também a situação na qual o tempo de busca é fixo a priori de modo que o desempenho dos algoritmos é medido pela fração de buscas que encontraram a solução.

Palavras-chave: Charadas cripto-aritméticas. Algoritmos sócio-inspirados. Algoritmos bio-inspirados.

Referências:

1 FONTANARI, J. F. Imitative learning as a connector of collective brains. **PLoS One**, v. 9, n. 10, p. e110517-1e110517-7, 2014.
2 GOLDBERG, D. E. **Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning**. Reading, MA: Addison-Wesley, 1989.
3 HUNTER, J. A. H. **Mathematical brain teasers**. New York: Dover, 1976.

252

PG103

Estratégias em quimioinformática para uma série de compostos antichagásicos

MEDEIROS, A. R.[1]; FERREIRA, L. L. G.[1]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

alex.medeiros@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A doença de Chagas é uma doença tropical negligenciada causada pelo *Trypanosoma cruzi* que afeta de 6 a 7 milhões de pessoas em todo o mundo. (1) A doença é endêmica em 21 países da América Latina, mas também atinge a América do Norte, Europa, Ásia e Oceania. Os dois fármacos disponíveis para o tratamento da doença – benznidazol e nifurtimox – possuem alta toxicidade e baixa eficácia, principalmente na fase crônica da doença, o que demonstra a urgência da descoberta e desenvolvimento de novos fármacos. (2) A cruzaína, principal cisteíno protease do *T. cruzi*, é essencial para o ciclo de vida do parasita e é um alvo molecular validado na busca de novos fármacos. (2) Este trabalho teve como objetivo o desenvolvimento de modelos de Relações Quantitativas entre Estrutura e Atividade (QSAR, termo em inglês para *Quantitative Structure-Activity Relationships*), para uma série de inibidores da cruzaína que apresentam atividade anti-*T. cruzi*. O conjunto de dados utilizado consiste em 37 derivados imidazólicos planejados e avaliados no Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC), para os quais foram determinados os valores de IC50 (concentração necessária para inibir 50% da atividade enzimática) contra a cruzaína. (3) Primeiramente, foram desenvolvidos modelos de QSAR 2D: AutoQSAR (r^2 = 0,89; q^2 pred = 0,90) e Holograma QSAR (HQSAR; r^2 = 0,92; q^2 LOO = 0,71; r^2 pred = 0,80). Estes modelos revelaram propriedades estruturais bidimensionais fortemente associadas à atividade biológica. Em seguida, foram desenvolvidos modelos de QSAR 3D: Análise Comparativa dos Campos Moleculares (CoMFA, r^2 =0,99; q^2 LOO = 0,72 e r^2 pred = 0,81) e Análise Comparativa dos Índices de Similaridade Molecular (CoMSIA; r^2 = 0,96; q^2 LOO = 0,63 e r^2 pred = 0,73). Estes modelos apontaram características moleculares 3D correlacionadas à atividade dos inibidores. Os modelos de QSAR 2D e 3D apresentaram alta consistência estatística interna e capacidade de predição externa para o conjunto teste. Os mapas de contribuição 3D e contorno 2D foram examinados juntamente com a conformação dos ligantes no sítio ativo da cruzaína obtidas por acoplamento molecular. A análise integrada dos modelos de QSAR e dos complexos biomoleculares revelaram informações essenciais acerca do reconhecimento intermolecular cruzaína-ligante que determinam a atividade biológica do conjunto de compostos estudado. Esse conhecimento será útil na otimização, síntese e avaliação de novos inibidores da cruzaína com atividade anti-*T. cruzi*.

Palavras-chave: QSAR. *Trypanosoma cruzi*. Doença de Chagas. Cruzaína. Planejamento de fármacos.

Referências:

1 DRUGS FOR NEGLECTED DISEASES INITIATIVE. **O que é a doença de Chagas?** Disponível em: https://www.dndial.org/doencas/doenca-chagas/. Acesso em: 27 set. 2020.

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 SOUZA, M. L. *et al*. Discovery of potent, reversible, and competitive Cruzain inhibitors with Trypanocidal activity: a structure-based drug design approach. **Journal of Chemical Information and**

Modeling, v. 60, n. 2, 1028-1041, 2020.

254

PG104

Descoberta de compostos novos híbridos de Marinoquinolina com derivados de Artemisinina como inibidores de Plasmodium falciparum

ZANINI, C.[1]; CAPITÃO, R. M.[2]; SANTO, R. D. E.[3]; CORREIA, C. R. D.[2]; AGUIAR, A. C. C.[1]; GUIDO, R. V. C.[1]

camila.zanini@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Química - Unicamp

[3]Microbiológica Química e Farmacêutica - Rio de Janeiro - RJ

A malária humana é uma doença causada por cinco espécies diferentes do parasito do gênero *Plasmodium spp* e transmitida pelas fêmeas do mosquito *Anopheles spp*. Dentre as cinco espécies citadas anteriormente, *P. falciparum* é a responsável pela forma mais grave e responsável pelo maior número de mortes. Sendo predominante no continente africano, o mais afetado mundialmente. (1) O tratamento recomendado pela Organização Mundial de Saúde para a malária causada pelo *P. falciparum* são as Terapias de Combinação com Derivados de Artemisinina (ACTs). Estratégia baseada na combinação de dois antimaláricos para o tratamento de pessoas infectadas: um derivado de Artemisinina, com ação rápida e meia vida curta, e um antimalárico de meia vida longa, que impede a recrudescência. Contudo, casos de resistência às ACTs foram registrados no Sudeste asiático (1), além disso, parasitos com mutações no gene de resistência aos derivados de Artemisinina foram reportados na África. (2) Portanto, é urgente a busca por novos antimaláricos eficazes e seguros. A estratégia de hibridação molecular é do desenvolvimento de novos fármacos de forma rápida e de baixo risco, pois são utilizados fármacos com efeitos conhecidos. As Marinoquinolinas são uma classe de compostos foram estudadas em nosso laboratório como novos candidatos a fármacos antimaláricos. Essas apresentam alta potência contra diferentes cepas de P. falciparum e razoável tolerabilidade tanto in vitro quanto in vivo. (3) Neste trabalho, empregamos a estratégia de hibridização molecular entre derivados Marinoquinolínicos e de Artemisinina para a descoberta de novos candidatos a fármacos antimaláricos. Os híbridos HB02, HB03, HB04 e HB05 foram sintetizados pelo grupo do Prof. Dr. Carlos Roque da UNICAMP e avaliados em nosso laboratório. Os resultados obtidos indicaram que os compostos HB02, HB03, HB04 e HB05, apresentaram valores de IC50 entre 3 e 10 nM contra as cepas 3D7 (sensível) e IPC4912 (resistente a Artemisinina). Além disso, os compostos não apresentaram toxicidade contra células HepG2 (Índice de Seletividade >10). O híbrido HB04, composto representativo da série, não demonstrou resistência cruzada nos ensaios contra um painel de cepas *P. falciparum* resistentes aos antimaláricos padrões. Os derivados HB02 e HB03 foram mais potentes do que a combinação de seus compostos de origem, sugerindo que o processo de hidridação molecular foi importante para a obtenção de compostos mais potentes. Ensaios de recrudescência com a cepa 3D7 de *P. falciparum* na presença dos híbridos indicaram que os compostos HB02 e HB04 não permitiram a recrudescência dos parasitos, enquanto os híbridos HB03 e HB05 permitiram. Nossos resultados indicam que a hibridação molecular é uma estratégia atrativa para a descoberta de novas entidades químicas promissoras para o tratamento da malária.

Palavras-chave: Malária. *Plasmodium falciparum*. Híbridos.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World malaria report 2019**. 2019. Disponível em: https://www.who.int/malaria/publications/world-malaria-report-2019/en/. Acesso em: 23 mar. 2020.
2 UWIMANA, A. *et al*. Emergence and clonal expansion of in vitro artemisinin-resistant *Plasmodium falciparum* kelch13 R561H mutant parasites in Rwanda. **Nature Medicine**, v. 26, n. 10, p. 1602-1608, 2020.
3 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.

256

PG105

Reconstrução do $\mathrm{X_{max}}$ de chuveiros atmosféricos usando telescópios Cherenkov

GILER, A. G. D.[1]; SOUZA, V.[1]

andres.delgado@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Um chuveiro atmosférico é uma cascata de partículas geradas pela interação de um primário de alta energia que pode ser um raio cósmico (como próton, ferro, etc.) ou raio gama (fóton) próximo ao topo da atmosfera. O número de partículas no início multiplica-se, depois atinge um máximo e, finalmente, atenua-se. A profundidade atmosférica onde o número máximo de partículas é produzido, $\mathrm{X_max}$ (medido em $\mathrm{g/cm^2}$), depende da energia e do tipo do primário. O $\mathrm{X_max}$ de um chuveiro atmosférico é um parâmetro importante que pode ser usado para estudar a composição da massa dos raios cósmicos e as propriedades das interações hadrônicas para altas energias. A detecção de chuveiros atmosféricos com energias entre 10^9 eV (1 GeV) e 10^{14} eV (100 TeV) é feita por observatórios de raios gama (como VERITAS, HESS ou CTA). (1) Telescópios desses observatórios conhecidos como "telescópios Cherenkov"são capazes de medir a luz Cherenkov produzida pelas partículas do chuveiro que viajam mais rápido do que a velocidade da luz no ar. O objetivo principal desses observatórios é a detecção de chuveiros gerados por raios gama considerando os chuveiros gerados por raios cósmicos como contaminação. Nesse sentido, propomos o uso de observatórios de raios gama para estudar o desenvolvimento de chuveiros atmoféricos gerados por raios cósmicos. Apresentamos um método para reconstruir o $\mathrm{X_max}$ de chuveiros atmosféricos usando a luz Cherenkov detectada por esses telescópios. Este estudo é baseado em simulações e está dividido em duas partes: a primeira corresponde à simulação dos chuveiros atmosféricos e dos telescópios utilizando o software CORSIKA (2), e a segunda corresponde à reconstrução do perfil longitudinal a partir das detecções dos telescópios. A quantidade de fótons detectada pelo telescópio é proporcional às partículas do chuveiro ao longo da atmosfera e à distribuição angular da luz Cherenkov, $\mathrm{f_C}$, em torno do eixo do chuveiro. Usando uma forma parametrizada de $\mathrm{f_C}$ (3), podemos reconstruir o perfil longitudinal e calcular o $\mathrm{X_max}$ para cada chuveiro. Além disso, calculamos a resolução do nosso método como a diferença entre o $\mathrm{X_max}$ simulado e o $\mathrm{X_max}$ reconstruído. A dependência energética da resolução é comparada para chuveiros atmosféricos reconstruídos iniciados por três tipos diferentes de primário: gama, próton e ferro, com energias de 1 TeV, 30 TeV e 100 TeV para cada primário.

Palavras-chave: Raio-cósmico. Chuveiro atmosférico. Reconstrução de perfil longitudinal.

Referências:

1 NAUROIS, M. de; MAZIN, D. Ground-based detectors in very-high-energy gamma-ray astronomy. **Comptes Rendus Physique**, v. 16, n. 6-7, p. 610-627, 2015. DOI 10.1016/j.crhy.2015.08.011.

2 HECK, D. *et al.* **CORSIKA**: a Monte Carlo code to simulate extensive air showers. 1998. Disponível em: https://www.iap.kit.edu/corsika/70.php. Acesso em: 17 jun. 2021.

3 ARBELETCHE, L.; SOUZA, V. de. Parametrization of the angular distribution of Cherenkov light in air showers. **European Physical Journal C**, v. 81, n. 2, p. 195-1-195-10, Feb. 2021.

PG106

Investigações de condensados de Bose-Einstein fora do equilíbrio

ARMIJOS, M. A. M.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; OROZCO, A. D. G.[1]; CASTILHO, P. C. M.[1]; TELLES, G.[1]; HENN, E.[1]

michelle.moreno@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Entender como sistemas quânticos de muitos corpos fechados relaxam e se termalizam quando inicialmente preparados longe do equilíbrio é uma das questões fundamentais da física moderna, relevante para muitas áreas de pesquisa, da cosmologia à física de altas energias. No entanto, apesar dos estudos intensivos, muitas questões ainda estão abertas. Em particular, foi proposto recentemente que sistemas quânticos fora de equilíbrio podem ser categorizados em classes com comportamento dinâmico universal, em analogia à universalidade decorrente de pontos fixos térmicos em teorias de transição de fase. Nessa contraparte dinâmica, entretanto, a universalidade surge devido à presença dos chamados pontos fixos não térmicos - estados metaestáveis do sistema quântico perturbado de muitos corpos. Na vizinhança desses pontos, os sistemas não apresentam traços de suas condições iniciais e têm sua evolução dinâmica caracterizada por apenas alguns parâmetros. A ideia de comportamento universal na vizinhança de pontos fixos não térmicos pode descrever com sucesso muitos fenômenos fora de equilíbrio diferentes de uma maneira generalizada. Um exemplo paradigmático de dinâmica distante do equilíbrio para a qual essa descrição universal é prevista é o regime turbulento quântico em fluidos quânticos. (1) A turbulência quântica surge quando muitos vórtices quânticos se enredam uns com os outros (2) e também quando ondas de densidade não linear combinam aleatoriamente. Neste trabalho, realizaremos a observação da dinâmica universal de um condensado de Bose-Einstein de $^{87}\mathrm{Rb}$ (BEC) fora do equilíbrio que é levado a atingir um regime turbulento. Ao realizar uma análise de escala da distribuição do momento evolutivo no tempo $n(k,t)$, pretendemos identificar um comportamento universal auto semelhante. Isso pode ser caracterizado por uma única função universal, em estreita analogia com o que foi recentemente observado no BEC após uma extinção repentina de interação e um tempo de espera respectivamente. Foi sugerido que campos longe do equilíbrio podem dar origem a um comportamento universal sinalizado pela propriedade de escala infravermelha das funções de distribuição. (3) Verificaremos também que um conjunto de diferentes amplitudes de excitação podem levar à mesma escala indicando um comportamento universal e independente das condições iniciais do sistema. Sendo assim, se mostra que em uma determinada faixa de momento, a distribuição $n(k,t)$ do sistema turbulento depende do espaço e do tempo apenas por meio de uma única função universal.

Palavras-chave: Turbulência quântica. Condensado de Bose-Einstein. Fora de equilíbrio.

Referências:

1 SCHEPPACH, C.; BERGES, J.; GASENZER, T. Matter-wave turbulence: beyond kinetic scaling. **Physical Review A**, v. 81, n. 3, p. 033611-1-033611-16, Mar. 2010. DOI 10.1103/PhysRevA.81.033611.
2 THOMPSON, K. J.; BAGNATO, G. G.; TELLES, G. D.; CARACANHAS, M. A.; SANTOS, F. E. A. dos; BAGNATO, V. S. Evidence of power-law behavior in the momentum distribution of a turbulent trapped Bose-Einstein condensate. **Laser Physics Letters**, v. 11, n. 1, p. 015501-1-015501-5, Jan. 2014. DOI 10.1088/1612-2011/11/1/015501.

3 ORIOLI, A. P.; BOGUSLAVSKI, K.; BERGES, J. Universal self-similar dynamics of relativistic and nonrelativistic field theories near nonthermal fixed points. **American Physical Society**, v. 92, n. 2, p. 025041-1-025041-25, July 2015. DOI 10.1103/PhysRevD.92.025041.

259

PG107

Crosslinking agent's influence on the ionic and electronic conductivity of PEDOT:PSS for application in bioelectronics: is the literature doing the best choice?

SOUZA, R. F. S.[1]; FARIA, G.[1]

rafael.francisco.sousa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

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 a 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 (GOPS), 3-chloropropyltrimethoxysilane (CLORO), 3-(Trimethoxysilyl)propyl methacrylate (TRIME) and Vinyltrimethoxysilane (VINIL). The electrical conductivity was evaluated by means of four-probe measurement, revealing that PEDOT:PSS films crosslinked with CLORO, VINIL and TRIME have similar electrical conductivity, while films crosslinked with GOPS have the lowest electrical conductivity compared with pristine PEDOT:PSS films. Other measurements, like transfer and output curves of the films, shows that GOPS, the most used crosslink agent by the literature to work with PEDOT:PSS films, is not the best choice when compared to the other three crosslink agents in this work, which gives better electrical properties to PEDOT:PSS films. Our work suggest that the usage of more optimized crosslink agents can enhance the performance of PEDOT:PSS mixed ionic-electronic conductor devices, such as a glycose biossensor, built and studied in this work.

Palavras-chave: Crosslinker. Organic. Electronic. PEDOT

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.

PG108

Evolução dirigida com linezolida e tedizolida da Staphylococcus aureus SA43, representante da linhagem ST5-SCC mec II, e comparação fenotípica de isolados derivados

ZENATTI, L.[1]; SOUSA, A. N. G. D. D.[1]; SILVA, G. V.[2]; CAMARGO, I. L. B. C.[1]

leticiazenatti@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Laboratório Maricondi - São Carlos - SP

Infecções por *S. aureus* ST5-SCC *mec* II resistentes à meticilina surgiram em hospitais brasileiros e são um desafio aos tratamentos devido à multirresistência. Tedizolida (TDZ) é a última oxazolidinona aprovada no país para tratar infecções cutâneas por cocos Gram-positivos. (1) Nosso objetivo foi observar se isolados resistentes a TDZ ou linezolida (LNZ) emergiriam após a evolução dirigida (ED) de *S. aureus* SA43, linhagem clínica representativa de ST5-SCC *mec* II. (2) Nos isolados derivados, avaliamos a alteração do *feet* bacteriano determinando o tempo de duplicação (TD), a resistência cruzada a LNZ ou TDZ e a concentração inibitória mínima (CIM) à daptomicina e vancomicina por microdiluição em caldo e ao ácido fusídico, amicacina, canamicina, ciprofloxacino, cloranfenicol, gentamicina, quinupristina/dalfopristina e sulfametoxazol/trimetoprim por disco difusão. Conduzimos a ED *in vitro* expondo a linhagem SA43 a níveis crescentes de TDZ e LNZ, em paralelo e em triplicatas, a partir de três colônias diferentes (experimentos A, B e C). Usamos Caldo Mueller-Hinton cátions ajustados fortificado com o antibiótico em três concentrações: CIM, $\frac{1}{2}$ CIM e 2xCIM. Após incubação a 37 °C por 24 horas, o tubo com a maior concentração de fármaco apresentando crescimento serviu como inóculo para a cultura seguinte. A ED foi conduzida por 34 dias, acrescidas de três passagens em meio livre de antibiótico para estabilização das linhagens derivadas. Populações resistentes surgiram em alguns experimentos durante a ED, mas se mostraram estáveis, devido à recombinação gênica, resultando em mudanças leves nas CIMs à TDZ ou LNZ. Embora o perfil de suscetibilidade a todos os antibióticos permaneça inalterado, observamos variações significativas nos diâmetros médios de alguns halos de inibição. Após a exposição à TDZ, o diâmetro do halo do ácido fusídico aumentou nos três experimentos. Em relação à exposição à LNZ, o diâmetro dos halos de inibição da amicacina aumentou nos três experimentos, enquanto que para a quinupristina/dalfopristina, diminuiu nos experimentos A e C. Houve um número maior de variações de diâmetro dos halos de inibição dos fármacos no experimento A exposto à LNZ. Comparamos as linhagens antes e após a ED exposição a ambas as oxazolidinonas e observamos TD aumentado em todos os isolados expostos a TDZ e nos experimentos A e C expostos à LNZ (o TD no experimento B permaneceu o mesmo). As populações resistentes foram estabilizadas em três passagens em meio sem antibióticos. A resistência permaneceu para duas populações derivadas do experimento A da ED com LNZ e não afetaram a sensibilidade à TDZ. O TD das linhagens resistentes não variaram com relação a *wild type*, porém ambas tornaram-se resistentes ao fármaco quinupristina/dalfopristina. Em conclusão, mesmo com a pressão gerada pela presença do medicamento, as populações resistentes observadas durante a ED não permaneceram após as passagens. A maioria dos isolados derivados alterou o TD, sugerindo possíveis mudanças no fitness bacteriano. Este estudo sugere que TDZ é tão segura quanto LNZ para esta linhagem pois após ED com LNZ e TZD, as linhagens derivadas não sofrem alterações estáveis no padrão de suscetibilidade a todos os medicamentos testados.

Palavras-chave: Resistência bacteriana. Linezolida. Tedizolida. MRSA.

Referências:

1 WILLEKENS, R. *et al.* Early oral switch to linezolid for low-risk patients with *Staphylococcus aureus* bloodstream infections: a propensity-matched cohort study. **Clinical Infectious Diseases**, v. 69, n. 3, p. 381-387, 2019.
2 DABUL, A. N. G.; CAMARGO, I. B. C. Molecular characterization of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* resistant to tigecycline and daptomycin isolated in a hospital in Brazil. **Epidemiology and Infection**, v. 142, n. 3, p. 479-483, 2014.

262

PG109

Aumento da emissão de fluorescência da molécula de perileno através da formação de nano-partículas orgânicas e sua potencial aplicação como marcador biológico

GALINDO, D. M.[1]; AKIYAMA, J.[1]; COCCA, L. Z.[1]; BONI, L.[1]

danyellen.galindo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O advento de novos materiais orgânicos emissivos, em que é possível alterar as propriedades fotofísicas, tem chamado atenção devido as suas aplicações em optoeletrônica e áreas relacionadas as ciências biológicas. Esta última inovando na de obtenção de diagnósticos clínicos utilizando técnicas como a microscopia de fluorescência para a detecção de doenças com a utilização de marcadores biológicos fluorescentes. (1) As alterações das propriedades ópticas de um determinado material podem estar relacionadas a fatores como interação entre moléculas da mesma espécie ou com outras moléculas, por exemplo: matrizes poliméricas e distintos tipos de solventes utilizados. Mudanças, como o aumento ou a diminuição da emissão fluorescente, podem ser observadas quando esse tipo de interação acontece. Além disso, a estrutura molecular do material utilizado deve ser levada em consideração em muitos casos. Moléculas que possuem grande quantidade de cadeias com anéis aromáticos, tendem a possuir valores elevados de eficiência quântica de fluorescência (EQF), normalmente da ordem de até 99%. (2) Isto, em muitos casos, ocorre devido as progressões vibracionais existentes nos estados eletrônicos do material. Também existem estudos que visam melhorar os ganhos na das EQF de materiais quando esses são colocados em uma mistura específica de solventes. Isto ocorre devido a interação entre as moléculas, levando a formação de nanopartículas orgânicas, causando um aumento da fluorescência. Este fenômeno é denominado de Emissão induzida por agregação (Aggregation-induced Emission - AIE). Para interações em que a fluorescência é suprimida pelo efeito de agregação temos o que se conhece por Extinção induzida por agregação (Aggregation-caused Quenching - ACQ). Esse trabalho tem como principal objetivo o estudo da dependência das propriedades fotofísicas de uma nova molécula orgânica de Perileno devido a uma mistura binária de solventes biológicos, o dimetilsufóxido (DMSO) e a água. Inicialmente, o perileno foi dissolvido em diferentes proporções de água/DMSO para uma concentração constante e pequena do perileno. Medidas de espectroscopia óptica em função dessas proporções de solventes foram realizadas visando observar a alteração dos estados energéticos da molécula. Os resultados mostraram tanto uma alteração na absorção quanto na emissão fluorescente do perileno, estas fortemente dependentes da mistura binária. O resultado mais significativo, com potencial aplicação em diagnósticos e como meio ativo de lasers aleatórios, pode ser observado na emissão de fluorescência do composto. Observou-se um aumento máximo da EQF para 63% para uma proporção 40/60 de Água/ DMSO, um aumento de 5 vezes quando o cromóforo se encontra dissolvido em água apenas. Este aumento da EQF pode estar relacionado a formação de nano-partículas orgânicas, em que os perilenos se aglomeram por ligações de Van der Waals ou de dipolo. Para proporções menores de DMSO, existe a formação de microagregados que precipitam-se. Neste caso, as taxas não radiativas são fortemente privilegiadas diminuindo drasticamente a fluorescência. Este estudo e o entendimento do mecanismo dos processos fotofísicos em solventes biológicos é de extrema importância principalmente em situações em que é necessária baixa toxicidade do meio.

Palavras-chave: Perileno. Nano agregados. Espectroscopia.

Referências:

1 XU, X. *et al*. Improving the quantum yields of perylene diimide aggregates by increasing molecular hydrophobicity in polar media. **ChemPhysChem**, v. 18, n. 18, p. 2430-2441, 2017.
2 MEI, J. *et al*. Aggregation-induced emission: together we shine, united we soar! **Chemical Reviews**, v. 115, n. 21, p. 11718-11940, 2015.

264

PG110

Caracterização óptica e bioquímica da melanina e seu efeito na resposta da terapia fotodinâmica: modelo em células de melanoma pigmentado

SOUZA, G.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]; KURACHI, C.[1]

giancarlo.souza@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Dentre os diferentes tipos de câncer diagnosticados no Brasil, o câncer de pele é a forma mais frequente desta doença. Mesmo com apenas 3% de incidência dentre as lesões de pele, o melanoma se destaca por ser a forma que é caracterizada por alta agressividade, crescimento acelerado, e alto potencial metastático dessa espécie de lesão. Com isso, melanomas são responsáveis por 79% das mortes decorridas dentre os cânceres de pele. (1) As formas de diagnóstico e tratamento de melanoma atualmente empregadas são através de cirurgias na região da lesão, podendo acarretar complicações quando localizadas em regiões sensíveis do corpo como a área dos olhos, por exemplo. Nas últimas décadas, técnicas ópticas para o diagnóstico e tratamento de lesões de pele como Análise de fluorescência estacionária e dinâmica e Terapia fotodinâmica, surgiram como formas promissoras de abordar esse problema. (2) A pigmentação natural presente nas células de melanoma provoca alta absorção da luz, diminuindo a eficiência da aplicação de técnicas ópticas e, desta forma, é um desafio a ser batido para o aumento da eficácia dessa forma de tratamento. (3) Neste contexto, o entendimento dos mecanismos de formação das moléculas de melanina, as organelas em quais elas são agregadas (melanossomas) e suas propriedades ópticas é de fundamental importância para a implementação de melhorias no diagnóstico e tratamento dessas doenças. O objetivo deste trabalho é realizar a caracterização óptica, e bioquímica diferentes parâmetros de cultura e fotobiomodulação em diferentes comprimentos de onda a fim de compreender quais parâmetros são capazes de alterar a produção de melanina em células de melanoma em vitro e o estudo da contribuição da melanina na resposta fotodinâmica por absorção linear e de dois fótons.

Palavras-chave: Melanoma. Melanina. Caracterização óptica.

Referências:

1 BRASIL. Ministério da Saúde. Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva. **Estimativa 2016**: incidência de câncer no Brasil. Rio de Janeiro: INCA, 2015.

2 BALDEA, I.; FILIP, A G. Photodynamic therapy in melanoma: an update. **Journal of Physiology and Pharmacology**, v. 63, n. 2, p. 109-118, Apr. 2012.

3 HUANG, Y.-Y. *et al.* Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry**, v. 394, n. 2, p. 239-250, Jan. 2013.

PG111
Localização de Anderson em cristais fotônicos naturais

MATTOS, V. S.[1]; BARRERA-PATIÑO, C. P.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; CASTRO NETO, J. C.[1]
vicente.mattos@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho apresenta um estudo de propriedades ópticas e estruturais de cristais fotônicos naturais. O fenômeno de iridescência, que é a propriedade de um material refletir diferentes cores de acordo com o ângulo de observação, é apresentado em diferentes espécies de insetos. (1) As asas das borboletas *Morpho cypris* e *Greta oto* assim como da cigarra brasileira (*Quesada gigas*) apresentam o efeito de iridescência, e isto ocorre devido aos arranjos nanométricos nas superfícies. Os estudos nas superfícies foram feitos baseados nas imagens de microscopia eletrônica de varredura das asas, o que permitiu o trabalho com o tamanho correto dos arranjos em cristais de uma e duas dimensões para os modelos de estudo de dispersão de luz nas superfícies. (2) A desordem inerente presente nas asas foi analisada no contexto da localização de Anderson. (3) Os objetivos deste trabalho foram de medir a localização de Anderson nas asas de cigarra e borboletas usando um Autocorrelator (Single Shot Autocorrelator – SSA – from Coherent), e um laser pulsado femtossegundo (laser Libra Ti:Safira de 450 mW, 1 KHz de frequência e 850 nm – Coherent). Propomos aqui o estudo do efeito de iridescência e o efeito da desordem noas estruturas fotônicas naturais sem alterar os aspectos das asas usadas no estudo. Os resultados podem ajudar na implementação de tecnologias para biomateriais e desenvolvimentos industriais. A montagem experimental foi a inserção das asas transparentes (cigarra e *G. oto*) no caminho óptico do laser antes deste entrar no SSA, assim como na parte interna deste, com duas possibilidades de caminho óptico (móvel e fixo) e verificar as alterações da inserção das asas no perfil de autocorrelação do laser. Quando o feixe do laser atravessa o autocorrelator, este passa por um beam splitter e o feixe segue dois caminhos distintos: um fixo e um móvel, este é responsável pelo atraso no pulso do laser, fazendo possível a medida do atraso desse pulso devido à alteração na intensidade da autocorrelação. Com este estudo, estaremos medindo o atraso no tempo de um pulso quando o feixe cruza a amostra, uma vez que isso muda o caminho óptico em relação ao pulso sem a amostra. Os atrasos causados pela amostra e a localização do pulso dentro da amostra, que é da ordem de femtossegundo. Alguns resultados preliminares indicam o atraso devido a amostra em cerca de 15-40 fs, mas ajustes são necessários para verificação do efeito.

Palavras-chave: Localização de Anderson. Cristais fotônicos. Autocorrelator.

Referências:

1 VUKUSIC, P.; SAMBLES, J. R. Photonic structures in biology. **Nature**, v. 424, n. 6950, p. 852-855, 2003.
2 JOANNOPOULOS, J. D. ; MEADE, R. D.; WINN, J. N. **Photonic crystals**: molding the flow of light. Princeton: Princeton University Press, 1995.
3 BARRERA-PATIÑO, C. P. *et al.* Photonic effects in natural nanostructures on *Morpho cypris* and *Greta oto* butterfly wings. **Scientific Reports**, v. 10, p. 5786-1-5786-11, 2020. DOI 10.1038/s41598-020-62770-w.

PG112

Caracterização e modelagem da topologia de vasos sanguíneos do córtex de camundongos

BORSATO, V. E. K.[1]; COMIN, C. H.[2]

vinicius.borsato@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

A análise e modelagem da topologia de vasos sanguíneos possui importantes aplicações em um amplo espectro de áreas de pesquisa. (1) Em diversos tipos de tecidos, vasos sanguíneos se organizam em um vasto sistema de transporte com um grande número de segmentos e bifurcações. Uma abordagem para representar e estudar esse vasto sistema interconectado é através de técnicas de teoria de redes, que oferecem poderosas ferramentas para a caracterização sistemática das propriedades topológicas deste tipo de sistema. (2) Neste contexto, o presente projeto tem como objetivo realizar a caracterização e modelagem das propriedades topológicas de vasos sanguíneos presentes no córtex de camundongos. Partindo da representação em redes complexas de imagens de vasos sanguíneos previamente obtidas por microscopia confocal, serão realizadas aferições e análise estatística de suas propriedades topológicas. A seguir, utilizando as distribuições estatísticas de tais propriedades, será proposto um modelo para a geração de topologias artificias de vasos sanguíneos. Por fim, será investigado o uso das propriedades estudadas e do modelo desenvolvido na definição de métodos de data augmentation (3), que auxiliam na aplicação de técnicas de aprendizado de máquina em redes de vasos sanguíneos.

Palavras-chave: Redes complexas.

Referências:

1 LACOSTE, B. *et al.* Sensory-related neural activity regulates the structure of vascular networks in the cerebral cortex. **Neuron**, v. 83, n. 5, p. 1117-1130, Sept. 2014.
2 FONTOURA, L. da C. *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, May 2011.
3 SHORTEN, C.; KHOSHGOFTAAR, T. M. A survey on image data augmentation for deep learning. **Journal of Big Data**, v. 6, p. 60-1-60-48, July 2019. DOI 10.1186/s40537-019-0197-0.

267

PG113
Platinum micromachining using femtosecond laser pulses

ROCHA, L. E. R.[1]; PAULA, K. T.[1]; MENDONÇA, C. R.[1]
luiz.eduardo.rocha@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Among the many techniques for micromachining, the Direct Laser Writing (DLW) introduces some advantages to the process, such as high resolution, size, and thickness control, while maintaining the materials proprieties after the procedure. The Laser Induced Forward Transfer (LIFT) is a DLW technique, whose principle is to transfer energy from the laser pulse to the sample, ejecting material droplets from the region where the laser beam is focalized. The technique can be performed using ultrashort laser pulses, which leads to nonlinear light-matter interaction, enabling high-resolution depositions and avoiding degradation of the transferred material. A wide variety of materials can be studied with LIFT, including metals. (1) The metals micromachining has been drawing attention due to its applications. Platinum micromachined structures are used to produce sensors, because of the material stability in different conditions and other applications. In this work, thin films of platinum (Pt) have been used as donor material for fs-LIFT. To characterize the deposition of Pt on glass, optical microscopy and scanning-electron microscope were used. Besides, the influence of the pulse repetition rate, pulse energy, and scanning speed on the produced features was investigated. It was possible to determine the optimum irradiation parameters, as well as the threshold fluence. The incubation effect was also studied to examine the influence of the number of pulses per sample spot in the material deposition characteristics. The depositions were made using a laser system centered at 1030 nm (1 to 12 and 100 kHz and pulse energy of μJ). It was observed that the optimum parameters are achieved with higher energies, as the depositions get more homogeneous and well-defined.

Palavras-chave: Platinum. Femtosecond laser micromachining. Laser induced forward transfer.

Referências:

1 KUZNETSOV, A. I. *et al.* Laser-induced jet formation and droplet ejection from thin metal films. **Applied Physics A**, v. 106, n. 3, p. 479-487, 2012.

PG114

Estudo da glicosiltransferase LafB de Enterococcus faecium envolvida na hipersensibilidade à daptomicina

ESQUÉN, P. H.[1]; MUNIZ, J. R. C.[1]; CAMARGO, I. L. B. C.[1]

pamelahuanambal@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Nas últimas décadas, as bactérias resistentes a múltiplos fármacos (MDR) se tornaram um problema importante de saúde pública em todo o mundo. A fim de promover a pesquisa e o desenvolvimento de novos antibióticos, a Organização Mundial da Saúde classificou um grupo de bactérias MDR quanto à prioridade, entre as quais se encontra Enterococcus faecium resistente à vancomicina, classificado como microrganismo de alta prioridade para a busca de novos fármacos. (1) Entre as opções terapêuticas de último recurso para combater infecções causadas por Enterococcus sp. está a daptomicina, no entanto, a resistência desses microrganismos a este antibiótico já foi relatada. Recentemente, nosso grupo detectou uma mutação no gene lafB de E. faecium que levou à hipersensibilidade a daptomicina. (2) O gene lafB codifica a glicosiltransferase LafB, uma proteína envolvida na via de formação da âncora do ácido lipoteicóico (LTA), que também está presente em outras bactérias gram-positivas como *Listeria monocytogenes* e *Enterococcus faecalis*. (3) Deste modo, este trabalho procura verificar o papel da mutação do gene lafB no fenótipo bacteriano e caracterizar biofisicamente a proteína LafB, pois é um alvo promissor para aumentar a atividade da daptomicina em bactérias gram-positivas. Para este fim, inicialmente avaliamos a concentração inibitória mínima das linhagens pra confirmar as sensibilidades à daptomicina, determinamos o tempo de duplicação e avaliamos a capacidade de formação de biofilme das linhagens estudadas. Após as confirmações dos fenótipos de susceptibilidade à daptomicina, observamos que as linhagens hipersensível (2.1) e resistente (3.6) à daptomicina cresceram mais lentamente em comparação à linhagem 2.7 que apresenta sensibilidade normal à daptomicina, com tempos de duplicação de 360±30; 300±8 e 281±11 minutos, respectivamente; encontrando-se diferencia significativa apenas entre a linhagem hipersensível (2.1) e a normal (2.7). Por outro lado, a pesar dos dados mostrarem que a linhagem resistente (3.6) forma mais biofilme que a normal (2.7) e que a hipersensível (2.1) forma menos biofilme que a normal (2.7), estatisticamente, não houve diferença significativa entre elas. Em seguida, caracterizaremos fenotipicamente as linhagens normal e mutantes, expondo-as a várias condições utilizando a tecnologia Omnilog Phenotypic Microarray (Biolog, EUA) e também faremos a clonagem, expressão e purificação da proteína LafB normal e mutante, que serão estudadas utilizando dicroísmo circular, ensaios dinâmicos de dispersão de luz e fluorescência de varredura diferencial.

Palavras-chave: *Enterococcus*. Resistencia bacteriana. Grampositivo.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Prioritization of pathogens to guide discovery, research and development of new antibiotics for drug-resistant bacterial infections, including tuberculosis**. Geneva: WHO, 2017. Disponível em: https://www.who.int/medicines/areas/rational_use/PPLreport_2017_09_19.pdf?ua=1. Acesso em: 18 jun. 2021

2 MELLO, S. S. *et al.* A mutation in the glycosyltransferase gene lafB causes daptomycin hypersusceptibility in *Enterococcus faecium*. **Journal of Antimicrobial Chemotherapy**, v. 75, n. 1, p. 36-45, Jan. 2020.

3 REICHMANN, N. T.; GRÜNDLING, A. Location, synthesis and function of glycolipids and polyglycerolphosphate lipoteichoic acid in gram-positive bacteria of the phylum *Firmicutes*. **FEMS Microbiology Letters**, v. 319, n. 2, p. 97-105, June 2011.

270

PG115

Investigação da resposta imunológica in vitro em câncer de pele melanoma após combinação de radioterapia e terapia fotodinâmica

LOPES, R. G.[1]; INADA, N. M.[1]; MEDEIROS, A. I.[2]; FARIA, C.[1]

raphaelguimalopes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Faculdade de Ciências Farmacêuticas - UNESP

O melanoma é responsável por cerca de 1% de todos os tumores malignos de pele, entretanto representa a forma mais agressiva e mortal de câncer de pele. (1) Dependendo das características do tumor como a localização, o estágio e o perfil genético, as opções terapêuticas podem ser ressecção cirúrgica, quimioterapia, radioterapia, terapia fotodinâmica (TFD) e imunoterapia. (1) A TFD é uma modalidade terapêutica onde uma molécula fotoativável, o fotossensibilizador (FS), é excitada com luz em um comprimento de onda específico para gerar espécies reativas de oxigênio (EROs) ou radicais livres, que reagem com o microambiente local, causando a morte celular. (2) Estudos relataram que a TFD sozinha tem eficácia limitada em melanomas, devido a mecanismos de proteção, como pigmentação e resistência ao estresse oxidativo. (2) Diante essas circunstâncias, a terapia fotodinâmica, pensada em conjunto com outras terapias, como a radioterapia e a imunoterapia, podem não apenas matar os tumores primários diretamente, como induzir a morte celular imunogênica pela ativação de uma resposta imune eficaz. (3) Nesta pesquisa estamos investigando a resposta imunológica *in vitro* em células de tumor de pele do tipo melanoma murino (B16F10) após tratamento combinado de terapia fotodinâmica e radioterapia. Uma clorina (Photodithazine ou PDZ) é o FS de escolha e no momento estamos padronizando os protocolos com todas as variáveis (concentrações de FS e doses de luz emitida em 660 nm), alcançando um nível de morte celular moderada (entre 20 a 30%) e a partir dessas condições, iniciar a combinação com a radioterapia, avaliando os tipos de morte celular envolvidos e a resposta imunológica por meio da combinação das terapias.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Radioterapia. Morte celular.

Referências:

1 AMERICAN CANCER SOCIETY. **Cancer facts and figures 2017**. Atlanta: ACS, 2017.
2 HUANG, Y.-Y. *et al.* Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry**, v. 394, n. 2, p. 239-250, 2013.
3 DUAN, X.; CHAN, C.; LIN, W. Nanoparticle-mediated immunogenic cell death enables and potentiates cancer immunotherapy. **Angewandte Chemie**, v. 58, n. 3, p. 670-680, Jan. 2019.

271

PG116

Dielectric profile of a Langmuir hydrated membrane model by molecular dynamics simulation

ZAPATA, J. C. B.[1]; MOURA, A. F.[2]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[1]

juan.burbano@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Understanding the electrical activity of the cell membrane and particularly its dielectric behavior in its different adjacent regions is of great theoretical and experimental interest. In this work we have applied a computational molecular dynamics (DM) methodology that consists of moving a small test charge in a Langmuir bilayer model of hydrated palmitoyloleoylphosphatidylcholine (POPC), calculating the free energy during its displacement from the center to the bulk of water. We thus obtained a dielectric profile as a function of the position where each component of the system has its particular electric contribution due to the dipole moments induced in response to the local dielectric permittivity. (1) We observe that the highest dielectric contribution is found from the permanent dipole POPC headgroups compared to other regions, while the lowest contribution is found in the hydrophobic zone of the POPC tails. These results are in agreement with those obtained through other methodologies for this system. (2)

Palavras-chave: Membrane model. Molecular dynamics simulations. Dielectric permittivity.

Referências:

1 CHACHAJ-BREKIESZ, A. *et al*. Electrical properties of membrane phospholipids in Langmuir monolayers. **Membranes**, v. 11, n. 1, p. 53-1-53-11, Jan. 2021.
2 NYMEYER, H.; ZHOU, H.-X. A method to determine dielectric constants in nonhomogeneous systems: application to biological membranes. **Biophysical Journal**, v. 94, n. 4, p. 1185-1193, Feb. 2008.

272

PG117

Diagnóstico point-of-care do tumor hepático usando dispositivo microfluídico de papel

RIBEIRO, L. V.[1]; ZUCOLOTTO, V.[1]

luisavogado@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de um dispositivo microfluídico em papel para a detecção diferencial e a quantificação da alfa-fetoproteína (AFP) e do antígeno carcinoembrionário (CEA), biomarcadores para o diagnóstico do tumor hepático. O carcinoma hepatocelular (HCC) é a forma mais comum de tumor maligno primário do fígado, correspondendo a 90% dos casos da doença, sendo um dos tipos mais letais de câncer, de rápido desenvolvimento da metástase. (1) No tumor hepático, o diagnóstico precoce é particularmente desafiador, pois os sintomas raramente aparecem antes dos estágios mais avançados da doença e pequenas lesões são difíceis de detectar em exames físicos ou de imagem; ademais, a evolução maligna do tumor é rápida quando este está associado com a cirrose, o que corresponde a 80% dos casos. (2) Para contornar estas dificuldades, a detecção combinada dos biomarcadores por biossensores do tipo point-of-care possibilita o monitoramento e diagnóstico em tempo real de doenças, incluindo o câncer, através de medidas reprodutíveis e confiáveis, realizadas no local do atendimento. (3) Este trabalho propõe a construção de um dispositivo de diagnóstico empregando o método colorimétrico de quantificação via sinalização por nanopartículas de ouro, de modo a simplificar os procedimentos e reduzir os custos no diagnóstico de HCC. Cada componente do biossensor será montado e seu desempenho testado passo a passo através de curvas de calibração, descrevendo o teste quanto à sua sensibilidade, especificidade e reprodutibilidade. Será realizada a otimização do desempenho do dispositivo por meio do ajuste dos parâmetros construtivos e das condições da reação de bioreconhecimento em cada área do dispositivo. O poder preditivo do teste de diagnóstico será determinado por meio da construção de curvas características de operação do receptor. Espera-se obter um dispositivo portátil, de baixo custo e fácil utilização, altamente sensível e específico para os biomarcadores analisados, de modo a possibilitar o diagnóstico precoce de HCC.

Palavras-chave: Nanomedicina. Biomarcadores. Biossensores. Sistemas microfluídicos. Diagnóstico *point-of-care*.

Referências:

1 CHAGAS, A. *et al*. **Carcinoma hepatocelular**: barreiras ao acesso ao diagnóstico e tratamento no cenário brasileiro atual. 2017. Disponível em: http://observatoriodeoncologia.com.br/outros_estudos/CARCINOMA.pdf. Acesso em: 18 jun. 2021.

2 REIBERGER, T. *et al*. An orthotopic mouse model of hepatocellular carcinoma with underlying liver cirrhosis. **Nature Protocols**, v. 10, n. 8, p. 1264-1274, Aug. 2015.

3 ZUCOLOTTO, V. Specialty grand challenges in biosensors. **Frontiers in Sensors**, v. 1, n.3, Aug. 2020. DOI 10.3389/fsens.2020.00003.

273

PG118
Ameaça das fake news à segurança epistêmica

TÓRTURA, H. A.[1]; FONTANARI, J. F.[1]
henrique.tortura@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O avanço tecnológico e científico de uma comunidade, bem como a tomada de decisões para a coordenação de ações coletivas, depende das práticas dos indivíduos e da propagação de conhecimento entre eles. Uma comunidade epistêmica pode ser então entendida, em sentido amplo, como o grupo de agentes que produzem conhecimento, que o propagam e que o consomem (para a tomada de decisões, mudança de práticas ou para se dedicar a procura de novos conhecimentos). A capacidade de uma tal comunidade identificar e combater a propagação e assimilação de informações falsas define sua segurança epistêmica, sendo que, para a garantia desta, é necessário o conhecimento de quais são as principais ameaças e vulnerabilidades epistêmicas (1), que englobam, por exemplo, agentes que propagam erros por mal intento ou engano e a rejeição de informação nova por vieses de confirmação. A proposta do presente trabalho é adaptar o modelo epistêmico de Philip Kitcher (2) - inicialmente concebido para comunidades científicas (apenas produtoras de conhecimento), em que agentes têm motivações tanto epistêmicas quanto sociais – para abordar a criação e disseminação de informações falsas. Procuramos, através da simulação de diferentes custos e ganhos na obtenção, disseminação e detecção de informação falsa por diferentes agentes, entender quais são os melhores mecanismos e práticas para o avanço científico da comunidade como um todo e como garantir que ameaças epistêmicas possam ser controladas, garantindo que ações coletivas tenham maior efetividade.

Palavras-chave: Comunidades epistêmicas. Segurança epistêmica. *Fake news*.

Referências:

1 SEGER, E. *et al*. **Tackling threats to informed decision-making in democratic societies:** promoting epistemic security in a technologically-advanced world. London: Alan Turing Institute, 2020. 109 p.
2 KITCHER, P. **The advancement of science:** science without legend, objectivity without illusions. New York: Oxford University Press, 1993.

274

PG119

Influência da interface contato elétrico/pata termoelétrica no rendimento de geradores termoelétricos não planares

BOCCHI, J. H. C.[1]; PEREIRA, G. G. D.[1]; FARIA, G.[1]

joaohenriquebocchi@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A demanda por fontes de energia limpas e renováveis que permitam amenizar os efeitos do aquecimento global é cada vez maior. Nesse contexto, recuperar parte da energia térmica desperdiçada em processos industriais e domésticos é um caminho a ser seguido. Para isso, o desenvolvimento de eficientes geradores termoelétricos, os quais são capazes de transformar energia térmica em energia elétrica, por meio do efeito Seebeck, é um importante campo de pesquisa. (1) Dispositivos termoelétricos apresentam grandes vantagens como tamanhos reduzidos, compatibilidade com eletrônica flexível, operação silenciosa e ausência de partes móveis, o que gera uma alta confiabilidade. Entretanto, tais dispositivos possuem uma baixa eficiência, o que impede a ampla aplicação destes para geração de energia limpa em abundância. (2) Com o intuito de obter geradores mais eficientes, muitos esforços têm sido feitos, sendo um deles, o desenvolvimento de designs e geometrias otimizadas. Neste quesito, este trabalho estudou a influência da interface contato elétrico/pata termelétrica no rendimento de geradores termoelétricos não planares. Considerando duas configurações distintas de patas termelétricas, "preenchidas" e "vazadas", simulações usando o método dos elementos finitos (FEM) foram realizadas. As simulações foram realizadas aplicando uma diferença de temperatura fixa de 4K às extremidades dos geradores termoelétricos e variando o comprimento e a área da seção transversal das patas termelétricas. Analisando os resultados foi possível constatar o aumento da eficiência dos dispositivos, comparando o caso das patas "vazadas" com o caso patas "preenchidas", atingindo o valor máximo quando o comprimento das patas é de 500 nm e a área da secção transversal é de 0.0591 mm^2. Isso acontece, porque apesar da diferença de temperatura aplicada ao dispositivo permanecer constante, a diferença de temperatura aplicada às patas termelétricas para o caso "vazadas" é maior que para o caso "preenchida", ocasionada pela mudança da interface contato elétrico/pata termoelétrica. Assim sendo, foi possível comprovar que a interface contato elétrico/pata termoelétrica influencia significativamente na eficiência dos geradores termoelétricos.

Palavras-chave: Termoeletricidade. Gerador termoelétrico. Interface de contato.

Referências:

1 ROWE, D. M. (ed.). **Thermoelectrics handbook**: macro to nano. Boca Raton: CRC Press, 2006.
2 SHITTU, S. *et al*. Review of thermoelectric geometry and structure optimization for performance enhancement. **Applied Energy**, v. 268, p. 15075-1-15075-31, June 2020. DOI 10.1016/j.apenergy.2020.115075.

PG120

Reposicionamento farmacêutico através do desenvolvimento de cocristais droga-droga para o tratamento de Covid-19

NUNES, P.[1]; ELLENA, J.[1]

paulo.ns@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A descoberta e desenvolvimento de um novo medicamento ocorrem em três etapas: síntese de novas moléculas de medicamentos, estudo das propriedades dos materiais sólidos e finalmente o processo de formulação dos insumos farmacêuticos ativos e inativos que constituem um medicamento. Este é um processo demorado que pode custar até 2 bilhões de dólares. Em contraposição a este esquema clássico de obtenção de novos medicamentos, este projeto de pesquisa visa o desenvolvimento de insumos farmacêuticos inovadores, eliminando o estágio de desenvolvimento por meio do processo de reposicionamento e reaproveitamento de drogas em combinação com os princípios da engenharia de cristais. Especificamente, essas ferramentas serão utilizadas para criar um sólido farmacêutico com atividade terapêutica no tratamento da COVID-19 a partir de dois ingredientes ativos que já se encontram no mercado a través do desenho de Cocristais Droga-Droga (CDD). Este processo tem o potencial de simultaneamente reduzir os custos e os riscos assim como o tempo de desenvolvimento de um novo produto, pontos chaves nos tempos atuais. Por outro lado, o desenho de novas forma sólidas de insumos farmacêuticos ativos tem provado, também, ser o melhor caminho para a solução de problemas farmacodinâmicos, oferecendo, portanto, uma ampla gama de oportunidades para a indústria farmacêutica. Esta abordagem tem como principal inspiração o fármaco Entresto® da Novartis, uns dos primeiros CDD comercializados com êxito. Este cocristal, aprovado pela Anvisa em 2017, oferece melhor farmacocinética e menor dose necessária para obter o mesmo efeito terapêutico que a soma dos insumos farmacêuticos ativos que o compõem. Ou seja, este fármaco mostrou que o desenho de CDD tem o potencial de obter um medicamento com desempenho farmacológico superior ao da simples mistura física dos seus componentes. Fazendo uso dessas informações, foram identificados 23 fármacos na literatura recente que tem apresentado resultados promissores no tratamento de COVID-19. Entre eles podemos destacar o Remdesivir, com apontamentos positivos associado a melhoras clínicas em pacientes (1), a Bromexina que apresentou bons resultados nos seus testes em forma de sólidas (2) e a combinação Lopinavir e Ritonavir (3) que é usualmente administrada em conjunto, apresentando boa afinidade com outros candidatos. Atualmente estes fármacos candidatos a reposicionamento encontrados na literatura estão em fase de análise, principalmente no que se refere ao cenário de formas sólidas por eles apresentados, a fim de identificar as interações intermoleculares adequadas que permitam otimizar o desenho de experimentos de síntese supramolecular dos potenciais CDDs. Esta primeira análise estatística das potenciais interações intermoleculares será realizada com o uso de base de dados estrutural Cambridge Strutural Database (CSD).

Palavras-chave: Engenharia de cristais. COVID-19. Co-cristais.

Referências:

1 BEIGEL, J. H. *et al.* Remdesivir for the treatment of Covid-19: final report. **New England Journal of Medicine**, v. 383, n. 19, p. 1813-1826, Nov. 2020. DOI 10.1056/NEJMoa2007764.

2 ZHANG, Y. *et al.* Bromhexine and its fumarate salt: crystal structures, Hirshfeld surfaces and dissolution study. **Journal of Molecular Structure**. v. 1233, p. 130154-1-130154-8, June 2021. DOI

10.1016/j.molstruc.2021.130154.
3 HUNG, I. F.-N. *et al*. Triple combination of interferon beta-1b, lopinavir-ritonavir, and ribavirin in the treatment of patients admitted to hospital with COVID-19: an open-label, randomised, phase 2 trial. **Lancet**, v. 395, n. 10238, p. 1695-1704, May-June 2020. DOI 10.1016/S0140-6736(20)31042-4.

277

PG121

Caracterização e uso de nanoemulsões de indocianina verde para o tratamento de doenças por terapias envolvendo a luz

JASINEVICIUS, G. O.[1]; TOVAR, J. S. D.[1]; KASSAB, G.[1]; TOMÉ, A. J. B.[1]; INADA, N. M.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; KURACHI, C.[1]; BUZZÁ, H. H.[1]

gabriel.jasine@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A indocianina verde (ICG) é um corante orgânico, anfifílico e solúvel em solventes orgânicos como o metanol. Essa molécula fotossensível foi aprovada para o uso clínico desde a década de 50 e possui propriedades óticas adequadas para a inativação fotodinâmica (IFD). Estudos realizados *in vivo* em camundongos comprovaram a atividade fotodinâmica da ICG na inativação da bactéria *S. pneumoniae*, causadora da pneumonia, com a eficiência de redução de 5 Log (UFC/mL) do microrganismo. O animal foi iluminado de maneira extracorpórea, com o comprimento de onda na faixa de 780nm e a ICG foi administrada por instilação. (1) Além disso, a ICG possui a capacidade de se reorganizar, como muitos corantes orgânicos, em agregados-J, que possuem como característica um *red-shift* e estreitamento no pico de absorção de luz das moléculas. Essa forma de agrupamento da ICG promove funções fototérmicas (PTT) e fotoacústicas excelentes como candidato para o tratamento de tumores. Estudos realizados *in vivo* em camundongos mostraram a redução completa de tumores de câncer de mama da linhagem 4T1 após a PTT com o uso de nano-agregados J da ICG. (2) Apesar das qualidades óticas variadas da ICG, ela sofre em soluções aquosas processos de agregação e degradação. Um estudo realizado sobre a estabilidade da ICG em soluções aquosas em sangue humano mostraram a perda de fluorescência da molécula relacionado a um processo de dimerização, depreendido do HPLC da mesma. (3) Com isso, esse projeto pretende utilizar-se de nanoemulsões de ICG (NanoICG) para que se possa superar tais problemas que a molécula sofre e assim melhorar sua eficiência tanto para PDT quanto para PTT. Como a ICG é usada como o surfactante anfifílico da nanoemulsão, outra vantagem da NanoICG é a possibilidade de carregar no seu interior hidrofóbico outros compostos. Nesse projeto, vem sendo utilizada a NanoICG vazia e a mesma com curcumina em seu interior (NanoICG-C). Para sua aplicação, foram caracterizadas suas propriedades de estabilidade, dimerização, fluorescência, agregação e analisadas suas propriedades fototérmicas em *phantoms*. A curcumina no interior da NanoICG-C ajudou a mitigar o processo de dimerização do composto, mantendo por mais tempo suas propriedades óticas de fluorescência em soluções aquosas, tornando-a mais adequada para a IFD. Assim, com a caracterização dessas nanoemulsões, as propriedades fotodinâmicas das nanoemulsões serão analisadas na inativação da *S. pneumoniae in vitro*. No quesito fototémico da molécula, percebeu-se que com o tempo, havia uma tendência de dimerização e formação de agregados-J das nanoemulsões. Isso se mostrou muito eficiente para a fototermia. Com a irradiação a 1 W/cm^2 em 808nm em *phantoms* na concentração de 200 uM das nanoemulsões, foi possível observar um aumento de temperatura em torno de 80°C em *phantoms*. As nanoemulsões também se provaram eficientes na produção de calor após injeção intratumoral delas em melanoma cutâneo de camundongos irradiados a 1W/cm^2.

Palavras-chave: Inativação fotodinâmica. Terapia fototérmica. Indocianina verde. Nanoemulsão.

Referências:

1 GERLADE, M. C. *et al.* Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumina-

tion: an experimental model. **Physiological Reports**, v. 5, n. 5, p. e13190-1-e13190-7, 2017.
2 LIU, R. *et al*. Nano-sized indocyanine green j-aggregate as a one-component theranostic agent. **Nanotheranostics**, v. 1, n. 4, p. 430-439, 2017.
3 MINDT, S. *et al*. Stability and degradation of indocyanine green in plasma, aqueous solution and whole blood. **Photochemical and Photobiological Sciences**, v. 17, n. 9, p. 1189-1196, 2018.

279

PG122

Can quantum correlations be verified as physical resources in quantum processes?

NEVES, L. R. T.[1]; BRITO, F. B.[1]

rodrigoneves@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The extension of concepts such as internal energy, heat, work and reversibility towards the realm of genuinely quantum systems far from equilibrium is a major quest in contemporary physics. In particular, searching for a concrete connection between quantum correlations and energy exchanges is, from the point of view of newly-emerging quantum technologies, a central task from which one might expect both advantageous and undesirable outcomes. In a recent communication, for instance, experimentalists claimed to have verified that a quantum engine working in a coherent superposition can achieve a higher power than its classical counterpart. (1) Meanwhile, a theoretical approach recently devised by our group addressed a consistent definition of internal energy change, as well as its decomposition into work and heat, for a fully quantum, autonomous-universe model system - namely, a qubit under exchange interaction with a one-photon electromagnetic pulse. (2) Later on, we found theoretical support for the generalization of this approach onto the case of a qubit under virtually arbitrary conditions, also determining a simple relation between work and coherences for such a general framework. (3) It is in this context and on these grounds that we wish to address the question featuring in the title of this project. By probing our formalism in a larger number of specific model systems, we expect to find a path towards establishing thermodynamical relations in an increasingly general context, hopefully so as to sustain the methods and definitions adopted thus far - later seeking to extend them to systems of larger dimensionality as well. Furthermore, in the course of this research, we intend to address an inquiry also on the (eventual) role played by statistical fluctuations in the relation between correlations and thermodynamic quantities, which may constitute an important complementary approach to the one being currently worked on by us. In short, we hope to be able to shed light on the role of "quantumness" to the energetic balance, testing as thoroughly as possible those that have been our basic theoretical hallmarks: a totally quantum-mechanical description of interactions, and an intrinsically dynamical notion of energy.

Palavras-chave: Quantum thermodynamics. Open quantum systems. Thermodynamics of information.

Referências:

1 KLATZOW, J. *et al.* Experimental demonstration of quantum effects in the operation of microscopic heat engines. **Physical Review Letters**, v. 122, n. 11, p. 110601-1-110601-6, Mar. 2019.
2 VALENTE, D.; BRITO, F.; FERREIRA, R.; WERLANG, T. Work on a quantum dipole by a single-photon pulse. **Optics Letters**, v. 43, n. 11, p. 2644-2647, June 2018.
3 NEVES, L. R. T. **Quantum thermodynamical work beyond the Markovian limit**. Advisor: Frederico Borges de Brito. 2020. 23 p. Course conclusion assignment (Physics Undergraduate Program) - São Carlos Institute of Physics, University of São Paulo, São Carlos, 2020.

280

PG123

Sistemas termodinâmicos fora do equilíbrio e a igualdade de Jarzynski

DRINKO, A.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]

adrinko@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

No estudo de processos termodinâmicos utilizamos muitos sistemas que se encontram no regime de equilíbrio e/ou sua evolução ocorre de forma suficientemente lenta para que os estados acessados pelo sistema durante a evolução também sejam estados de equilíbrio. (1) Esta abordagem é utilizada especialmente em sistemas isolados. Entretanto em sistemas abertos não é viável ou mesmo possível manter tais condições de equilíbrio, desta forma nossa abordagem deve levar em consideração este novo regime de análise. Para tal fim apresenta-se a igualdade de Jarzynski, a qual pode ser tratada inicialmente como uma versão aprimorada da segunda lei da termodinâmica, apresentando a relação entre trabalho e a variação da energia livre de Helmholtz do sistema. (2) Sua construção parte do princípio de que o trabalho exercido sobre um sistema termodinâmico é uma variável aleatória devido a flutuações e interações diversas. Assim para um ensemble de realizações de um processo obtemos uma distribuição de probabilidades de trabalho, em que agora passamos a avaliar a sua média. (2) A igualdade de Jarzynski também é válida para sistemas cuja evolução dos estados ocorra fora do equilíbrio, importando-se apenas com os estados inicial e final que podem ser atingidos dada uma distribuição de valores de trabalho que ao avaliarmos a sua média podemos retornar à forma convencional da Segunda Lei da Termodinâmica. (1)

Palavras-chave: Igualdade de Jarzynski. Sistemas fora do equilíbrio. Termodinâmica.

Referências:

1 JARZYNSKI, C. Equalities and inequalities: Irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale. **Annual Review of Condensed Matter Physics**, v. 2, p. 329-351, Mar. 2011. DOI 10.1146/annurev-conmatphys-062910-140506.

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

PG124
Cargas aceleradas e o princípio da equivalência

WESTIN, R.[1]; VANZELLA, D. A. T.[1]
raian.westin@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde 1897 já é sabido que cargas aceleradas emitem radiação eletromagnética, com a potência dessa emissão dada pela Fórmula de Larmor (1) e é proporcional ao quadrado da aceleração da carga. Já em 1915 foi descoberta a Teoria da Relatividade Geral de Einstein, que tem como uma de suas hipóteses, o Princípio da Equivalência, que afirma que, apenas com experimentos locais, não é possível diferenciar se você está em um foguete com aceleração própria constante, ou parado em um campo gravitacional. (2) Juntando esses 2 conceitos básicos, é razoável que surja a pergunta "Se, o eletromagnetismo diz que cargas aceleradas irradiam, e, o Princípio da Equivalência diz que aceleração é equivalente a estar parado em um campo gravitacional, isso significa que uma carga elétrica em repouso aqui na superfície da Terra deve estar emitindo radiação?". Nós sabemos que uma carga elétrica em repouso na superfície da Terra não emite radiação, se fosse o caso teríamos uma fonte de energia infinita. Então isso significa que é possível "quebrar"o Princípio da Equivalência apenas com uma carga acelerada e levar toda a Relatividade Geral por água abaixo com isso? Também não, a solução desse problema/paradoxo aparente está relacionada ao fato de que *radiação* é um conceito definido de maneira *global*, enquanto o *Princípio da Equivalência* diz respeito à propriedades *locais* do espaço-tempo, então comparar esses conceitos é algo não trivial. O objetivo desse trabalho é mostrar que, apesar desses 2 conceitos aparentarem ser conflitantes, quando saímos dos experimentos mentais e vamos fazer as contas, as equações do Eletromagnetismo, juntamente com as da Relatividade, apresentam resultados completamente consistentes. A solução desse aparente paradoxo é que, o próprio conceito de *radiação* depende de referencial, então, referenciais acelerados junto com a carga não conseguem medir um fluxo de energia/radiação vindo da carga, enquanto referenciais inerciais conseguem medir a radiação. Durante o trabalho, apresentarei a explicação desse resultado, tanto do eletromagnetismo clássico, quanto com o formalismo de Teoria Quântica de Campos (3), mostrando que, por estranho que possa parecer, essa noção de que *radiação depende de referencial* é essencial para conciliar os resultados medidos pelo observador acelerado, com os do observador inercial.

Palavras-chave: Eletromagnetismo. Relatividade.

Referências:

1 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to electrodynamics.** 4th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
2 WALD, R. M. **General relativity**. Chicago: University of Chicago Press, 1984.
3 LANDULFO, A. G. S.; FULLING, S. A.; MATSAS, G. E. A. Classical and quantum aspects of the radiation emitted by a uniformly accelerated charge: Larmor-Unruh reconciliation and zero-frequency Rindler modes. **Physical Review D**, v. 100, n. 4, p. 045020-1-045020-8, Aug. 2019.

282

PG125

Ensaio de MTT múltiplo na análise de morte reprodutiva por fotobiomodulação combinada à radioterapia em células endoteliais

COSTA, C.[1]; FARIA, C.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

camilla.santos.costa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A radioterapia (RT) é um tratamento padrão no tratamento de câncer, utilizada há mais de um século. Ela consiste na irradiação do tecido tumoral com radiação ionizante, capaz de causar dano às células principalmente por meio da quebra de ligações no DNA através da formação de espécies reativas de oxigênio (ROS). Esses efeitos, quando não reparados, provocam morte celular. (1) A sensibilidade celular frente à radiação ionizante relaciona-se à fase do ciclo celular, capacidade de reparo do DNA e oxigenação do tecido. Nesse contexto, a hipóxia tumoral é um fator importante na eficácia do método, uma vez que tumores bem vascularizados e com altas taxas de perfusão são mais suscetíveis à radiação ionizante. A terapia por fotobiomodulação (PBMT), por sua vez, consiste na iluminação de tecidos por luz, geralmente na faixa do vermelho e infravermelho próximo, capaz de ativar vias de sinalização com consequentes: aumento da síntese de ATP, geração de ROS, aumento da proliferação celular, redução da inflamação e aumento da oxigenação tecidual. (2) Tais efeitos relacionam-se a sensibilização tumoral à radiação ionizante. Existem evidências de que a PBMT é capaz de potencializar os efeitos da RT, apesar dos mecanismos não estarem completamente elucidados. Portanto, esse projeto se baseia na hipótese de que a combinação das técnicas pode alterar o microambiente do tumor, interferindo na resposta à radioterapia e tem o objetivo de analisar os efeitos da PBMT na vascularização tumoral. Para isso, foram realizados experimentos *in vitro*, com células endoteliais (HUVEC - EA.hy926). O ensaio clonogênico é o mais indicado para analisar a morte reprodutiva de células após a irradiação, mas não é sempre factível, uma vez que a formação de colônias pode não ocorrer. As células EA.hy926 são uma linhagem cooperativa e tendem a morrer quando em baixas densidades. (3) Então, após testes preliminares onde se observou a não adequação do ensaio clonogênico, os efeitos proliferativos do tratamento proposto foram analisados pelo ensaio colorimétrico MTT, no qual, quanto maior o número de células viáveis, maior o sinal de absorbância. Para associar o número de células ao sinal de absorbância, foi obtida uma curva de calibração, para cada tempo de incubação do MTT: 30 min e 2h, R^2 = 0,99356 (fit polinômio de ordem 3) e R^2 = 0,99594 (fit linear), respectivamente. Essas curvas mostraram que a incubação de 2h é mais apropriada, uma vez que apresenta comportamento linear. Foram realizados dois experimentos independentes combinando PBMT e RT, com intervalo de 24h, com 780nm-5J/cm^2 e 5.0Gy, respectivamente. A partir da absorbância foi determinado o número de células médio para os grupos controle, PBMT, RT e PBMT-RT entre 50h e 296h. Observou-se que os grupos começaram a mostrar respostas diferentes a partir de 146h. Em 296h, o grupo PBMT apresentou leve acréscimo em relação ao controle (8%) e a dose utilizada reduziu a proliferação dos grupos tratados com RT em 21%, sem diferença entre os grupos RT e PBMT-RT. Na sequência, serão realizados experimentos de protocolo fracionado, com 3 sessões alternadas de PBMT e RT.

Palavras-chave: Fotobiomodulação. Radioterapia. HUVEC.

Referências:

1 ZIMMERMAN, M. A. *et al*. Cell death-stimulated cell proliferation: a tissue regeneration mechanism usurped by tumors during radiotherapy. **Seminars in Radiation Oncology**, v. 23, n. 4, p. 288-295, Oct. 2013.
2 PASSARELLA, S.; KARY, 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, Nov. 2014. DOI 10.1016/j.jphotobiol.2014.07.021.
3 BRIX, N. *et al*. The clonogenic assay: robustness of plating efficiency-based analysis is strongly compromised by cellular cooperation. **Radiation Oncology**, v. 15, p. 248-1-218-12, 2020. DOI 10.1186/s13014-020-01697-y.

284

PG126

Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicos

BARBOSA, M. G.[1]; VANZELLA, D. A. T.[1]

matheusgb@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Horizontes causais desempenham um papel fundamental na abordagem termodinâmica da relatividade geral, sendo os principais exemplos o horizonte de eventos de um buraco negro e o horizonte de Rindler. Além destes, generalizações do conceito de cones de luz passado estão presentes em resultados que sugerem que os fenômenos gravitacionais podem ser compreendidos inteiramente em termos das leis da termodinâmica. (1) Dada essa importância de horizontes causais e a relação que termos de superfície do funcional gravitacional têm com parâmetros termodinâmicos (2), este projeto visa analisar a possibilidade de obter analogias termodinâmicas a partir de quantidades locais relacionadas à fronteira do passado causal de um dado observador. Eventualmente, pretende-se elucidar como os termos de superfície mencionados levam à esta intrigante conexão entre termodinâmica e gravitação.

Palavras-chave: Horizontes causais. Termodinâmica do espaço-tempo. Termodinâmica de buracos negros.

Referências:

1 JACOBSON, T.; PARENTANI, R. Horizon entropy. **Foundations of Physics**, v. 33, n. 2, p. 323-348, Feb. 2003.
2 CHAKRABORTY, S.; PADMANABHAN, T. Boundary term in the gravitational action is the heat content of the null surfaces. **Physical Review D**, v. 101, n. 6, p. 064023-1-064023-9, Mar. 2020.

PG127
Improving the description of hadronic tau decays

OLIANI, F.[1]; BOITO, D.[1]
fabio.oliani@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Integrated spectral function moments plays an important role in precise α_s extractions from $\tau \to$ (hadrons) $+ \nu_\tau$ and $e^+e^- \to$ (hadrons) below the charm threshold. We study how the renormalons of polynomial moments, which are singularities in the Borel plane, are related with the perturbative behaviour of the respective asymptotic series (1), first in the large-β_0 limit and then in Quantum Chromodynamics (QCD). The renormalon content can produce good or bad perturbative behaviors of the series depending on the moment used. In the large-β_0 limit, where the results are known exactly, we can observe how partial cancellations of renormalons lead to series which have good perturbative behavior and how the first IR renormalon leads to bad perturbative behavior. (2) Also, to improving the description of tau decays we can calculate the radiative electroweak corretions. Currently, these calculations are known only for tau kinematic moment (3), thus the contributions coming from another moments are neglected. To further improve, our proposal is generalize the radiative corrections to any moments used in the literature and study the impact of these calculations in realistic α_s extractions.

Palavras-chave: Quantum chromodynamics. Renormalons. Electroweak theory.

Referências:

1 BENEKE, M.; JAMIN, M. α_s and the τ hadronic width: fixed-order, contour-improved and higher-order perturbation theory. **Journal of High Energy Physics** , v. 2008, n. 09, p. 044-1-044-41, 2008. DOI 10.1088/1126-6708/2008/09/044.
2 BOITO, D.; OLIANI, F. Renormalons in integrated spectral function moments and α_s extractions. **Physical Review D**, v. 101, n. 7, p. 074003-1-074003-16, 2020. DOI 10.1103/PhysRevD.101.074003.
3 BRAATEN, E.; LI, C. S. Electroweak radiative corrections to the semihadronic decay rate of the τ lepton. **Physical Review D**, v. 42, n. 11, p. 3888-3891, 1990. DOI 10.1103/PhysRevD.42.3888.

PG128

Dissociação fotocatalítica da água utilizando luz solar simulada para produção de H2 combustível a partir da heterojunção SrTiO3/Fe2TiO5

CENTURION, H. A.[1]; GONÇALVES, R. V.[1]

higorcenturion@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os desafios inerentes ao uso de combustíveis fósseis motivam buscas por novos combustíveis renováveis e pouco poluentes, dentre estes, o Hidrogênio obtido pela dissociação fotocatalítica da água (do inglês *water splitting*), pode ser destacado como um excelente vetor energético, por ser um combustível com alta densidade energética, de fácil armazenamento e livre de emissão de CO2. (1) O SrTiO3 (STO), por apresentar adequadas posições de bandas para oxidar e reduzir a molécula de água, estabilidade em ambiente aquoso e abundância dos elementos que o compõe é um excelente material para realizar este processo. Contudo, este semicondutor apresenta limitações intrínsecas, como largo bandgap (3,2 eV) e alta taxa de recombinação de elétrons e buracos fotogerados, o que ocasiona a redução de sua atividade fotocatalítica. (2) Nesta perspectiva, a heterojunção entre STO e o Fe2TiO5 (FTO), o qual apresenta propriedades complementares ao titanato de estrôncio, como Bandgap de 2,1 eV e posições de bandas adequadas para oxidar a molécula de água (3), é uma excelente estratégia para melhorar a separação de cargas e deslocar a atividade fotocatalítica para a região do visível. Sendo assim, nanopartículas de FTO foram depositadas sobre o STO em pó, utilizando-se a técnica de pulverização catódica. Posteriormente, a heterojunção foi investigada via XPS, cujos resultados indicam a presença de FTO sobre o STO. Associado a formação desta heterojunção, observou-se um aumento na atividade fotocatalítica do fotocatalizador suspenso em água pura, para a produção de H2 e O2.

Palavras-chave: Dissociação fotocatalítica da água. SrTiO3. Heterojunção.

Referências:

1 GONÇALVES, R. V. *et al.* Photocatalytic water splitting by suspended semiconductor particles. *In*: SOUZA, F. L.; LEITE, E. R. (ed.). **Nanoenergy**: nanotechnology applied for energy production. 2nd ed. Cham: Springer, 2018. p. 107-140.

2 CHIANG, T. H. *et al.* Efficient photocatalytic water splitting using al-doped SrTiO3 coloaded with molybdenum oxide and rhodium-chromium oxide. **ACS Catalysis**, v. 8, n. 4, p. 2782-2788, 2018.

3 MELO, M. A. *et al.* Pseudobrookite Fe2TiO5 nanoparticles loaded with earth-abundant nanosized NiO and Co3O4 cocatalysts for photocatalytic O2 evolution via solar water splitting. **ACS Applied Nano Materials**, v. 3, n. 9, p. 9303-9317, 2020.

287

PG129

Primary particle type reconstruction using Cherenkov telescopes

PAULA, T.[1]; SOUZA, V.[1]

ferrazdepaula@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

High energy astrophysics studies cosmic particles that travel with highly energetic wavelengths and plays an important role in the development of advanced theories in high energy physics, such as dark matter. (1) When these particles reach Earth's atmosphere, they start an air shower process, where they interact with the atoms in the atmosphere, and these start a cascade reaction. The currently high experimental precision of Cherenkov telescopes allows access to data from these air shower interactions to simulated and estimate the origins of these cosmic particles. (2) In this work, we propose the study of the air shower and the production of Cherenkov light by studying data from the Very Energetic Radiation Imaging Telescope Array System and from Cherenkov Telescope Array. (3) The objectives are to describe the elemental interactions of the high-energy primary particles in the air shower by theoretical models and data analysis and the determination possibility of the type of the primary particle using the data from these two telescopes array.

Palavras-chave: Astroparticles physics. Cosmic rays.

Referências:

1 ALMEIDA, U. B. de. Cherenkov Telescope Array and the future of high-energy astrophysics. **Boletim da Sociedade Astronômica Brasileira**, v. 31, n. 1, p. 7-11, 2019.
2 GILER, A. G. D. *et al.* Measuring the depth of shower maximum of extensive air showers using Cherenkov light. **Astroparticle Physics**, v. 124, p. 102508-1-102508-13, 2021. DOI 10.1016/j.astropartphys.2020.102508.
3 PIERRE AUGER COLLABORATION. Measurement of depth of maximum of extensive air showers above $10^18 eV$.**Physical Review Letters**, $v.104, n.9, p.091101 - 1 - 091101 - 7, 2010.$

PG130

Aplicação de eletrofisiologia não-invasiva e instrumentação eletrônica dedicada na caracterização da sensibilidade visual de Gymnotus carapo

BELLINI, B. S.[1]; PINTO, R. D.[1]; ALMEIDA, L. B.[1]

beatriz.bellini@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Neuroetologia é uma subdivisão da Neurociência que estuda o comportamento animal e seu controle pelo sistema nervoso, na tentativa de entender como estímulos sensoriais são traduzidos em comportamentos naturais das espécies. (1) Devido à capacidade de gerar e detectar campos elétricos externos ao corpo, que permite ao experimentador o acesso não-invasivo aos sinais elétricos envolvidos no processamento de informação, peixes elétricos de campo fraco como *Gymnotus carapo* são modelos interessantes para estudos experimentais nessa área. Através da detecção de distorções nos campos elétricos autogerados, a espécie é capaz de criar uma imagem elétrica dos arredores, um comportamento conhecido como eletrolocalização. Além disso, esses animais podem estabelecer comunicação com coespecíficos através de modulações na frequência de produção de pulsos. (2) Ambos os comportamentos envolvendo o chamado "sentido elétrico" já foram caracterizados em diversos trabalhos científicos. Entretanto, outros sentidos, como a visão, foram pouco explorados. Sabe-se que, na presença de estímulos de diversas naturezas, *G. carapo* produz um padrão de pulsos elétricos chamado de *Novelty Response* (NR), caracterizado por um diminuição abrupta nos *Inter Pulse Intervals* (IPIs - Intervalos entre Pulsos), seguida por uma recuperação lenta. (3) Dessa forma, pretendemos analisar os efeitos de estímulos luminosos no comportamento elétrico destes animais, e a partir disso quantificar de maneira não-invasiva a sensibilidade do sistema visual da espécie em relação a diferentes características de estímulo. Para isso, utilizaremos um aparato experimental capaz de produzir estímulos de natureza visual com diversos parâmetros e detectar o sinal elétrico produzido pelos peixes. A produção de NR será utilizada como indicação de que os estímulos foram efetivamente percebidos por estes animais.

Palavras-chave: *Gymnotus carapo*. *Novelty response*. Sistema visual.

Referências:

1 EWERT, J. P. **Neuroethology**: an introduction to the neurophysiological fundamentals of behavior. Berlin: Springer-Verlag, 1980.

2 FORLIM C. G.; PINTO R. D. Automatic realistic real time stimulation/recording in weakly electric fish: long time behavior characterization in freely swimming fish and stimuli discrimination. **PLoS One**, v. 9, n. 1, p. e84885-1-e84885-14, 2014.

3 CAPUTI, A. A.; AGUILERA, P. A.; CASTELLÓ, M. E. Probability and amplitude of novelty responses as a function of the change in contrast of the reafferent image in *G. carapo*. **Journal of Experimental Biology**, v. 206, n. 6, p. 999-1010, 2003.

289

PG131

Redução de energia em módulos excitados não-abelianos em cordas cósmicas

GREGÓRIO, G. M.[1]; HARTMANN, B.[1]

gustavo.gregorio@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

É conhecido que existem modelos simples para módulos não-abelianos em defeitos topológicos (1) em especial e que esses módulos podem ser excitados, um desses defeitos é a corda de Abelian-Higgs. Estudos mostram que a tensão em alguns exemplos de cordas com módulos podem ser inferiores aos seus correspondentes de Abelian-Higgs (2), consequentemente tendo ângulos deficitários no espaço tempo também menores. Aqui pretendemos demonstrar essa diminuição e discutir seus resultados. Para isso, usaremos os métodos descritos em (3), com as variações de parâmetros convenientes.

Palavras-chave: Cordas cósmicas. Altas energias. Módulos não-abelianos

Referências:

1 SHIFMAN, M. Simple models with non-Abelian moduli on topological defects. **Physical Review D**, v. 87, n. 2, p. 025025-1-025025-4, Jan. 2013.
2 MONIM, S.; SHIFMAN, M. Degeneracy between Abelian and non-Abelian strings. **International Journal of Modern Physics A**, v. 29, n. 18, p. 1450105-1-1450105-10, July 2014.
3 ASCHER, U.; CHRISTIANSEN, J.; RUSSELL, R. D. Collocation software for boundary-value ODEs. **ACM Transactions on Mathematical Software**, v. 7, n. 2, p. 209-222, June 1981.

290

PG132

Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas

LUCHESI, A. C. F.[1]; BRUNO, O. M.[1]

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo do caos começou a ganhar notoriedade após Edward Lorenz observar que o arredondamento dos valores das condições iniciais alterava por completo uma previsão meteorológica (1), o que ficou conhecido como efeito borboleta. O mapa logístico, originalmente proposto como um modelo simples para descrever um crescimento populacional, consiste em uma relação de recorrência que teve suas propriedades bastante exploradas por Robert May.(2)

$$x_n = x_n - 1R(1 - x_n - 1) \tag{1}$$

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 superior a outros métodos.(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.

Palavras-chave: Teoria do caos. Órbitas caóticas. Mapa logístico. Aprendizado de máquina. Redes neurais.

Referências:

1 LORENZ, E. N. Deterministic nonperiodic flow. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 20, n.2, p 130–141, March 1963.
2 MAY, R. M. Simple mathematical models with very complicated dynamics. **Nature**, v. 261, n.5560,p. 459-467, June 1976.
3 JAEGER, H.; HAAS, H. Harnessing nonlinearity: predicting chaotic systems and saving energy in wireless communication. **Science**, v. 304,n.5667, p. 78-79, April 2004.

291

PG133

Estudos funcionais e estruturais de proteínas envolvidas na biossíntese de tiamina em Enterococcus faecalis

GUTIERREZ, R. F.[1]; WRENGER, C.[2]; NASCIMENTO, A. S.[1]

raissa.gutierrez@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Ciencias Biomedicas - USP

A resistência à antibióticos é um problema mundial, e a descoberta de novos antimicrobianos é umas das medidas essenciais para o combate da resistência. (1) A pesquisa por novos alvos moleculares e vias metabólicas específicas para patógenos humanos tem se destacado como estratégia e, neste contexto, encontra-se a via de biossíntese de tiamina (TBS). O pirofosfato de tiamina é o cofator ativo da vitamina B1 e é crucial para a manutenção da vida, porém não são todos os organismos capazes de produzi-lo. A via de TBS está presente em archaea, bactérias, fungos, plantas e, mais recentemente foi identificada em *Plasmodium falciparum*. Estudos recentes já exploram as enzimas envolvidas na via de TBS como potenciais alvos ao combate de bactérias multirresistentes.(2) Este projeto tem por objetivo estudar as proteínas TenA e ThiE, envolvidas na via de TBS da bactéria patogênica *Enterococcus faecalis*, umas das principais causas de infecções hospitalares. TenA é uma enzima bifuncional com atividade aminohidrolase e tiaminase tipo II e está envolvida na via de salvamento do precursor 4-amino-5-hidroximetil-2-metil pirimidina (HMP). (3) Para EfTenA foram avaliadas a interação da enzima recombinante com tiamina, monofosfato de tiamina (TMP) e pirofosfato de tiamina (TPP) por Fluorimetria Diferencial Quantitativa (DSFq) e a atividade tiaminase tipo II para os mesmos compostos por método colorimétrico de oxidação em tiocromo. A estrutura cristalográfica foi resolvida por difração de raios-X. Os resultados de DSF estimam que EfTenA interage na faixa de micromolar com a tiamina > TMP > TPP. EfTenA tem atividade específica de 28 $\pm$ 4 nmol/min.mg para a tiamina e de 0.7 $\pm$ 0.1 nmol/min.mg para o TMP (2.5% da atividade em tiamina). A EfTenA foi considerada virtualmente inativa em TPP, pois uma atividade residual foi identificada para o TPP após 24 h, mostrando que a tolerância do sítio ativo diminui significantemente a cada adição de grupos fosfato à molécula de tiamina. Na tentativa de obter um complexo EfTenA-TMP, uma solução concentrada de TMP foi adicionada aos cristais de EfTenA e em concordância com a atividade catalítica encontrada para TMP, observou-se uma densidade eletrônica compatível ao produto HMP ligado ao sítio ativo de EfTenA. Estes resultados ajudam a melhor descrever o papel de TenA na via. A enzima ThiE é uma tiamina monofosfato sintase e desempenha papel central na via de TBS acoplando os precursores foforilados de HMP e 5-(2-hidroxi etil)-4-metil tiazol (THZ) para formar TMP. Um conjunto de dados de difração de raios-X de EfThiE foi coletado na linha Manacá/Sirius (Campinas, Brazil) e está sendo processado. A expectativa é disponibilizar mais um exemplar de ThiE, já que não há muitas estruturas resolvidas desta proteína no Protein Data Bank até o momento.

Palavras-chave: Resistência bacteriana. Biossíntese de tiamina. Enterococcus faecalis.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Global Action plan on antimicrobial resistance**. Geneva:2015.ISBN 978 92 4. 150976 3.

2 MULLER, I.B.; HYDE, J.E.; WRENGER, C. Vitamin B metabolism in plasmodium falciparum as a

source of drug targets. **Trends Parasitology,**. v.26, n.1,p.35–43,2010.
3 JENKINS, A.H.; SCHYNS, G.:POTOT, S.; SUN, G.; BEGLEY, T.P. A new thiamin salvage pathway.**National Chemical Biology,**v.3, n.8,p.492–7,2007. DOI: 10.1038/nchembio.2007.13.

293

PG134

Um ensaio de modelagem por homologia para a estrutura RmlA de Streptococcus pneumoniae SP19-BS75

OLIVEIRA, L. F. M.[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]

louis.oliveira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A RmlA é a primeira enzima na via metabólica para a síntese de L-ramnose. Este monossacarídeo é um bloco de construção necessário para a síntese dos polímeros que contêm ramnose (RhaCW), que estão presentes na parede celular de certos tipos de bactérias e desempenham um papel na resistência aos antibióticos.(1) Assim, essa enzima é um alvo interessante para o desenvolvimento de novos fármacos contra esses patógenos.(2) Obtivemos a estrutura prevista do RmlA para a cepa SP19-BS75 de Streptococcus pneumoniae (3) pela técnica de Modelagem por Homologia usando servidores como I-TASSER e Robetta. Em cada caso, pelo menos cinco estruturas diferentes foram geradas e a melhor estrutura foi validada por um alinhamento estrutural exaustivo contra o Protein Data Bank usando o Dali Server. Sua estrutura foi usada para construir as espécies tetraméricas biologicamente ativas e posteriormente otimizadas por simulação dinâmica molecular. Esses resultados oferecem uma estrutura otimizada prevista, mais próxima da enzima encontrada na natureza e serão úteis no futuro para resolver o problema das fases durante a substituição molecular após ensaios experimentais de difração de raios-x em cristalografia de proteínas. Além disso, o modelo obtido atinge a confiabilidade necessária para seu uso em uma triagem baseada em estrutura de candidatos a inibidor.

Palavras-chave: Modelagem por homologia, RmlA, Dinámica molecular.

Referências:

1 MISTOU, M. Y.; SUTCLIFFE, I. C.; VAN SORGE, N. M. Bacterial glycobiology: Rhamnose-containing cell wall polysaccharides in gram-positive bacteria. **FEMS Microbiology Reviews**, v. 40, n. 4, p. 464–479, 2016.
2 BAUMGARTNER, J. *et al.* Structure of the Bacillus anthracis dTDP-l-rhamnosebiosynthetic enzyme glucose-1-phosphate thymidylyltransferase (RfbA). **Acta Crystallographica F,** v. 73, n. 11, p. 621–628, 2017. 3 MEDEIROS, M. I. C. *et al.* Antimicrobial susceptibility of streptococcus pneumoniae isolated from patients in the northeastern macroregion of São Paulo state, Brazil, 1998-2013. **Jornal Brasileiro de Patologia e Medicina Laboratorial,**v. 53, n. 3, p. 177–182, 2017.

294

PG135

Otimização da terapia fotodinâmica mediante a associação da terapia sonodinâmica para o tratamento do melanoma cutâneo em modelo animal

AYALA, E. T. P.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]; ALVES, F.

erikatoneth2021@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O melanoma cutâneo é o tipo menos frequente dentre os casos de câncer de pele, contudo é o tipo mais grave e de maior mortalidade, devido à sua alta possibilidade de se espalhar por toda a pele, bem como se disseminar para outros órgãos distantes provocando uma metástase.(1) O tratamento padrão para o melanoma é a ressecção cirúrgica no entanto ela é muito invasiva e agressiva em caso de lesões faciais onde o resultado da cicatrização é pouco estético dificultando a inserção do paciente na sociedade.(2) É assim que busca-se desenvolver novas opções terapêuticas, considerando-se resultados cosméticos e a preservação da função. A terapia sonofotodinâmica (TSFD) é uma abordagem não invasiva relativamente nova e promissora para o tratamento do câncer, baseada na combinação da terapia sonodinâmica (TSD) e fotodinâmica (TFD). Esta combinação visa melhorar as taxas de cura da TFD em casos em que a baixa penetração da luz no meio biológico é uma grande limitação, como por exemplo lesões pigmentadas, já que a presença da melanina nelas absorve e espalha a luz.(3) O presente estudo pretende avaliar a eficácia da TSFD no melanoma cutâneo em modelo animal usando o ácido 5-aminolevulínico (5-ALA), bem como encontrar um protocolo eficaz para eliminar essa doença.

Palavras-chave: Terapia sonodinâmica. Terapia sonofotodinâmica. Ácido 5-aminolevulínico. Melanoma cutâneo.

Referências:

1 ALADOWICZ, E. *et al.* Molecular networks in melanoma invasion and metastasis. **Future Oncology,** v. 9, p. 713–726, May 2013. DOI: https://doi.org/10.2217/fon.13.9.
2 ZALAUDEK, I. *et al.* Diagnosis and treatment of cutaneous melanoma: a practical guide. **SKINmed**, v. 2, n.1,p. 20–33, 2013. DOI: https://doi.org/10.1111/j.1540-9740.2003.01761.x.
3 TZERKOVSKY D.A. *et al* Sonodynamic and sono-photodynamic therapy in oncology, **Biomedical Photonics**, v.8, p. 31–46, 2019. DOI: https://doi.org/10.24931/2413-9432-2019-8-2-31-46.

295

PG136

Levantamento estatístico e os desafios de alunos com necessidades educativas especiais no Ensino Superior

MASSON, R.[1]; MUNIZ, S. R.[1]

rafaela.masson@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Dados do INEP (Instituto Nacional de Estudos e Pesquisas Educacionais) mostram, no último Censo Escolar da Educação Básica, um contínuo e expressivo aumento no número de matrículas de alunos com deficiência (educação especial) no ensino básico, atingindo mais de 930 mil matrículas em 2015 (352 mil deles na região Sudeste). Apesar disso, dados do IBGE no censo de 2010, mostram que apenas 6,2% dos indivíduos com deficiência concluem o ensino superior no Brasil.(1) Nos últimos anos, uma série de leis federais e estaduais têm garantido direitos e apoio a esses indivíduos e isso, certamente, representa um avanço importante, mas também é um grande desafio para o sistema educacional e os profissionais da educação. Como consequência desses fatos, dada a crescente demanda na educação básica, seria natural esperar um aumento proporcional do número de indivíduos chegando às universidades brasileiras, mas isso não parece ocorre. Na verdade, há poucos dados oficiais disponíveis quanto isso e o cenário atual não é claro. Ao mesmo tempo, percebe-se que a maioria das universidades brasileiras, especialmente as universidades públicas, não estão realmente preparadas para atender adequadamente essa demanda.(2) Em 2017, o INEP realizou um levantamento estatístico do ensino superior, onde foram computadas 2.448 unidades de Instituições de Ensino Superior, na qual, realizou-se 8.286.663 matrículas dentre 35.380 cursos de graduação ofertados. De todas as matrículas realizadas, o número de alunos com necessidades educativas especiais (NEE) foi de 38.272, o que corresponde a 0,46% dos alunos matriculados, muito menor que a taxa declarada pelo IBGE, ainda em 2010.(3) Um dos fatores que pode levar a este número é, talvez, a falta de contabilização das Universidades em relação aos seus alunos e, por consequência, a ausência de assistência aos mesmos. Até onde nosso estudo pode apurar, na USP, por exemplo, o anuário estatístico não apresenta indicativos do número de alunos com NEE, e não existe um sistema de informação que traga esse tipo de dado de forma acessível e transparente. Essa ausência de informação compromete o planejamento e implantação de políticas educacionais de apoio à permanência e evolução desses estudantes. Além disso, frequentemente os próprios estudantes não sabem como lidar com certos tipos de deficiência dos colegas, especialmente as deficiências intelectuais e algumas dificuldades de aprendizagem, o que dificulta o acolhimento dos estudantes com NEE. Finalmente, além de todas as dificuldades e limitações que afetam os poucos estudantes com NEE que conseguem chegar ao ensino superior, há ainda outra área onde as universidades poderiam contribuir mais, que é na formação de professores do ensino básico, através dos cursos de formação inicial (licenciaturas), que, de um modo geral, oferecem poucas oportunidades de discussão e treinamento específico nessas áreas. Diante desse cenário, esta pesquisa tem levantado dados da situação atual do campus da USP em São Carlos, buscando quantificar o número de alunos com algum tipo de deficiência, especialmente entre os ingressantes, tentando obter um perfil geral de cada unidade do campus. *emphasized text*

Palavras-chave: Censo de inclusão. Ensino inclusivo. Ensino superior inclusivo.

Referências:

1 INSTITUTO NACIONAL DE ESTUDOS E PESQUISAS EDUCACIONAIS ANÍSIO TEIXEIRA.INEP.

Sinopse estatística de Educação Superior 2017. Brasília: INEP, 2018. Disponível em: http://portal.inep.gov.br/basica-censo-escolar-sinopse-sinopse. Acesso em: 29 jan. 2019.
2 TOMELIN, K. N.; DIAS, A. P. L.; SANCHEZ, X. N. M.; PERES, J.; CARVALHO, S. Educação inclusiva no ensino superior: desafios e experiências de um núcleo de apoio discente e docente. **Revista de Psicopedagogia,**,v.35,n.106, p.94 – 103,2018. Disponível em:http://pepsic.bvsalud.org/pdf/psicoped/v35n106/11.pdf. Acesso em: 29 jan. 2019.
3 INSTITUTO NACIONAL DE ESTUDOS E PESQUISAS EDUCACIONAIS ANÍSIO TEIXEIRA.INEP. **Censo escolar da educacao basica 2016:**notas estatisticas..Brasilia: INEP, 2017.

297

PG137

Relações de Incertezas generalizadas entre variáveis termodinâmicas no regime quântico

AFONSO, R.[1]; PINTO, D. S.[1]

ricardo.afonso@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A termodinâmica descreve as propriedades do equilíbrio de um sistema macroscópico que interage com um meio de forma razoavelmente pragmática. No regime de acoplamento fraco, a interação entre sistema e meio são consideradas irrisórias e através da descrição macroscópica de estados termodinâmicos, torna-se possível descrever o sistema termodinâmico em termos de suas variáveis intensivas e extensivas. Porém, essa não é uma tarefa óbvia quando o acoplamento entre sistema e o meio é da mesma ordem de grandeza que suas energias (1) tanto no caso clássico como quântico. Nas últimas décadas, a metrologia tem sido desenvolvida no regime quântico de forma fundamental para formulação de sensores quânticos em escala atômicas, de tal modo que a flutuação de grandezas físicas desempenham um papel crucial para designar a qualidade de certos estimadores. Por exemplo, a noção de temperatura tem emergido do campo da termometria quântica, descrito por um estado canônico de equilíbrio térmico, mesmo em regime de acoplamento forte.(2) Utilizando ferramentas da metrologia foi possível derivar um resultado que coloca limites de incertezas fundamentais entre a energia interna e a temperatura dos sistemas para escalas de acoplamentos lineares arbitrários. Dentro 'ensemble' grão canônico, o impacto da indistiguibilidade de partículas quânticas para se estimar a temperatura e o potencial químico foi também analisado em um gás quântico.(3) Nosso trabalho se dedica a generalização das relações de incertezas termodinâmicas entre uma grandeza intensiva e outra extensiva para todos os regimes de acoplamentos no caso quântico através do estado generalizado Gibbs (EGG). Primeiro, demonstramos um limite fundamental entre a grandeza intensiva e extensiva para um estado EGG total, que seja possível tomar o traço dos graus de liberdade de um dos sistemas e avaliar a relação de incerteza no sistema de interesse. Depois disso, realizamos uma série de exemplos para corroborar os resultados já existentes na literatura, com isso mostrando a versatilidade do nosso método.

Palavras-chave: Ensemble generalizado de Gibbs. Relações de incerteza. Termodinâmica.

Referências:

1 KIRKWOOD, J. G. Statistical mechanics of [U+FB02]uid mixtures. **Journal Chemical Physics**. v.3, p.300–313,1935.DOI: https://doi.org/10.1063/1.1749657.
2 MILLER, H. J. D.; ANDERS, J. Energy-temperature uncertainty relation in quantum thermodynamics. **Nature Communications,**v.9, p.2203,2018.DOI: https://doi.org/10.1038/s41467-018-04536-7.
3 MARZOLINO,U.; BRAUN, D. Precision measurements of temperature andchemical potential of quantum gases. **Physical Review A**v.88, n.6,p.063609,2013.

298

PG138

Interaction mechanisms between Cytochrome P450 3A4 and membrane models associated with drug resistance

SANTOS, K. F.[1]; VASQUES, E. M.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[1]

kevin@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Cytochromes P450 (CYPs) are a family of hemoproteins responsible for the metabolism of several xenobiotics.(1) The catalytic activity and the amount of these enzymes can lead to the activation or deactivation of drugs (2), and therefore cytochromes P450 may be involved in cell resistance to chemotherapy. One strategy to investigate this problem is the use of membrane models such as Langmuir films that are formed at the air-water interface. Drugs and proteins can be included, and the interaction between these components evaluated by tensiometric, microscopic, and spectroscopic measurements. In this work, we developed a membrane model with the main lipids present in the endoplasmic reticulum where there is a large number of cytochromes P450 3A4 (CYP3A4). The lipids used were 1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DPPC), 1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphoethanolamine (DPPE), L-α-phosphatidylinositol from bovine liver (PI) and Cholesterol (Chol). We studied the influence of cholesterol and phosphatidylinositol on the properties of the membrane as a potential alteration expressed in cancer cells. In addition, we investigated the incorporation of CYP3A4 and Doxorubicin (DOX) in these models. Preliminary results indicate that the increase in Chol causes condensation of the monolayer, while the increase in PI causes an expansion. The incorporation of CYP3A4 and DOX varied with monolayer composition. This property can impact CYP3A4 activity, modifying the effects caused by DOX. The next steps will be to investigate these systems through polarization-modulated infrared reflection absorption spectroscopy (PM-IRRAS) and Brewster angle microscopy (BAM). We hope to demonstrate the influence of membrane composition on CYP3A4 activity against DOX, seeking to understand the molecular mechanisms mediated by these enzymes. Such knowledge may be relevant to develop strategies for diminishing drug resistance.

Palavras-chave: Cytochrome P450 3A4. Doxorubicin. Langmuir films.

Referências:

1 DENISOV, I. G. *et al.* Structure and chemistry of cytochrome P450. **Chemical Reviews**, v. 105, n. 6, p. 2253–2277, 2005.

2 MCFADYEN, M. C. E.; MELVIN, W. T.; MURRAY, G. I. Cytochrome P450 enzymes: novel options for cancer therapeutics. **Molecular Cancer Therapeutics**, v. 3, n. 3, p. 363–371, 2004.

PG139

Estudo da relaxação de sistemas quadrupolares via Ressonância Magnética Nuclear

LEAL, A. C. S.[1]; BONAGAMBA, T. J.[1]

adrianeleal@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos primeiros trabalhos reportados sobre relaxação em sistemas quadrupolares, utilizando a técnica de RMN, foi com núcleos de spin I = 1. O objetivo do trabalho foi entender como a interação quadrupolar influencia no alargamento dos multipletos do espectro dos núcleos de spin I = 1/2,também presentes no sistema. (1) O acoplamento quadrupolar foi considerado como a fonte do alargamento dos multipletos, e alguns testes experimentais foram realizados no sistema 14NH3. Posteriormente, foram desenvolvidos outros trabalhos reportando resultados teóricos para amostras l quidas e gasosas, em moléculas não esféricas e sistemas onde flutuações magnéticas e quadrupolares ıı estão presentes. Outros estudos para spins I > 1 foram publicados, como por exemplo, em sistemas anisotrópicos tilizando espectroscopia quadrupolar bidimensional e o estudo de espectroscopia de múltiplo quantum.Um dos primeiros modelos teóricos da relaxação explorou a transição de probabilidade por unidade de tempo entre dois estados.(2) Nesta teoria estudou-se vários sistemas de spins nucleares, tais como sistemas de spins isolados, sistemas de spins acoplados, spins nucleares acoplados com elétrons. As interações mais importantes consideradas foram as interações escalares, dipolares e quadrupolares.Por outro lado, existe outra maneira de descrever o procedimento teórico da relaxação, o qual é por meio da Teoria de Redfield. (3) Esta teoria é considerada mais completa porque utiliza-se de conceitos da Mecânica Quântica através do formalismo da matriz densidade. Além disso, considera-se a taxa de troca dos elementos fora da diagonal da matriz densidade, pois esses elementos carregam as densidades espectrais, as quais dão as informações dos tempos de relaxação longitudinal e transversal.Nesse sentido, neste trabalho, estudou-se um sistema de spin nuclear I = 7/2, resolvendo as componentes da matriz densidadeanaliticamente. Como resultado discutiu-se uma metodologia para quantificar os tempos de relaxação transversal e longitudinal.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Sistema quadrupolar. Teoria de relaxação de Redfield.

Referências:

1 POPLE. J. A. The effect of quadrupole relaxation on nuclear magnetic resonance multiplets.**Molecular Physics**, v.1, n.2,p,168–174, 1958.
2 ABRAGAM. A. **Principles of nuclear magnetism** Oxford: Oxford Science Publications,1994.
3 REDFIELD. A. G. On the theory of relaxation processes. **IBM Journal of Research and Development,**v.1,n.1, p.19–31, January 1957.

PG140

Estudo da funcionalização de materiais poliméricos para inativação fotodinâmica de biofilmes bacterianos

ZANGIROLAMI, A.[1]; BLANCO, K.[2]

zangirolami.amanda@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]USP

A Pneumonia Associada a Ventilação mecânica (PAV) é uma infecção grave (1) que pode ocorrer quando o tubo é instalado em pacientes que sofreram algum tipo de trauma, pós-cirúrgico ou apresentam dificuldades para respirar. A intubação de um paciente é realizada com a introdução do Tubo Endotraqueal (TE) através da boca e posicionado na traqueia, permanecendo no paciente até 7 dias. Esta infecção é causada com o desenvolvimento de biofilmes microbianos na superfície do tubo. O Staphylococcus aureus é o principal agente causador deste tipo de infecção e a mesma pode se manifestar entre 48 a 72h após a introdução do TE no paciente. (2) Entretanto, existem outras espécies que podem estar também presentes nestes biofilmes, como as espécies Pseudomonas aeruginosa e Klebsiella pneumoniae.(3) O objetivo deste projeto de doutorado é estudar os efeitos da inativação fotodinâmica (IF) antimicrobiana de TE funcionalizados com o fotossensibilizador (FS) curcumina (Cur) para ativação em luz azul, 450 nm em presença de oxigênio celular. Uma reação de funcionalização entre o TE e a curcumina foi estabelecida a partir de ligações covalentes entre as moléculas de PVC do tubo e da curcumina. Foram realizadas caracterizações físico-químicas do Tubo endotraqueal funcionalizado com curcumina (TEc) para estabelecer a funcionalização do FS no tubo por microscopia eletrônica de varredura; microscopia confocal; espectroscopia por infravermelho e espectroscopia em ultravioleta por refletância. Os testes para avaliar a eficácia antimicrobiana foi realizada em biofilmes de S. aureus, Escherichia coli, Pseudomonas aeruginosa, Klebsiella pneumoniae e S. aureus resistente a meticilina (MRSA) desenvolvidos no TEc; Testes toxicológicos foram realizados em células de mamíferos (Human dermal fibroblats neonatal); Uma fibra cilíndrica difusora acoplada ao laser (450 nm) construída pelo Laboratório de Apoio Tecnológico do IFSC (LAT) para auxiliar na iluminação no tubo foi caracterizada e otimizada; construção de um sistema respiratório contendo orofaringe-traqueia-pulmão, podendo estar ou não ligado ao respirador mecânico, para simulação da aplicação fotodinâmica em pacientes entubados sob uso do TE funcionalizado e iluminação por fibra óptica foi realizada. Resultados: os testes realizados in vitro com o TEc sob diversas doses de luz revelaram uma alta taxa de inativação de biofilmes de S. aureus, E. coli, P. aeruginosa, K. pneumoniae e MRSA, além de biofilmes multi-espécies desses microrganismos. Os testes toxicológicos em HDFn revelaram que a IF utilizando TEc não é tóxica para este tipo celular. A fibra cilíndrica difusora acoplada ao laser (450 nm) se mostrou eficiente para aplicação no TEc. A caracterização do novo TEc comprovou a presença da curcumina ligada as moléculas do tubo e uma alta toxicidade em diferentes biofilmes bacterianos a eficácia antimicrobiana com possibilidade de aplicação devido a baixa citotoxicidade em células de mamíferos.

Palavras-chave: Tubo endotraqueal. Pneumonia associada a ventilação mecânica. Biofilme. S. aureus. Imobilização. Curcumina.

Referências:

1 AL-TAWFIQ, J.A. *et al*. Decreasing ventilator-associated pneumonia in adult intensive care units using the Institute for Healthcare Improvement bundle. **American Journal of Infection Control**, v. 38, n. 7, p. 552–556, 2010.
2 BIEL, M.A. *et al*. Reduction of endotracheal tube biofilms using antimicrobial photodynamic therapy., **Lasers Surgery Medicine**,v.43,,n, 7,p. 586–590,June 2011.
3 TEIXEIRA, P.J.Z. *et al*. Pneumonia associada à ventilação mecânica: impacto da multirresistência bacteriana na morbidade e mortalidade. **Jornal Brasileiro de Pneumologia** v. 30, n. 6, p. 540–548, 2004.

302

PG141

Energia de vácuo na cosmologia moderna: modelos clássicos, vácuo adiabático e renormalização adiabática

OLIVEIRA, E. A. B.[1]

eduardo.amancio.oliveira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O modelo cosmológico padrão, usualmente denominado modelo CDM, tem apresentado enorme sucesso na descrição dos dados cosmológicos conhecidos a partir de pouquíssimos ingredientes fundamentais. Todavia, ele apresenta problemas fundamentais em aberto, a começar pelo fato de que a densidade de energia diretamente observável no universo é muito inferior àquela inferida gravitacionalmente pela Relatividade Geral; em particular, na escala cosmológica, se faz necessário introduzir uma "energia escura"para explicar a expansão acelerada do universo atual, bem como a ocorrência um período inflacionário primordial, este último necessário para explicar a extrema isotropia da Radiação Cósmica de Fundo (bem como o espectro das suas pequenas anisotropias) e planitude da seção espacial em grande escala. Para que essa energia escura possa explicar a dinâmica de expansão acelerada em ambas essas fases, é necessário que ela apresente características muito peculiares: ela deve estar distribuída de maneira extremamente homogênea no universo (isto é, sem formar estruturas), e apresentar pressões extremamente negativas, de magnitude comparável à sua densidade de energia. Embora exóticas quando comparadas com a maioria dos sistemas físicos conhecidos, tais características aparecem "naturalmente"em outro lugar: a energia de vácuo de teorias quânticas de campos. No presente projeto, exploramos a dinâmica da energia de vácuo em em espaçostempo de Friedmann-Lemaitre-Robertson-Walker (FLRW), tanto pela análise de modelos clássicos efetivos (1) quanto pelo estudo da quantização de campos livres em espaços curvos, com particular atenção na construção de expansões adiabáticas, que permitem definirmos os chamados estados de vácuo adiabáticos e computarmos o tensor energia-momentum renormalizado pela técnica de subtração adiabática.(2-3)Ainda a nível clássico, exploramos um modelo bastante simples de campo escalar autointeragente com quebra de simetria, o modelo $\lambda\phi^4$. Avaliando a sua dinâmica no chamado regime de 'rolagem lenta' – no qual o campo lentamente transiciona de um estado de vácuo instável altamente energético para um estado de vácuo estável no mínimo do seu potencial –, mostramos como é possível obter um regime inflacionário de expansão cósmica seguido de uma transição para uma expansão mais lenta dominada por matéria e radiação.(1) Para estendermos a análise a campos quantizados, no paradigma de gravitação semiclássica, há alguns desafios fundamentais. Primeiramente, não há em geral uma maneira unívoca de determinar um estado de vácuo em espaçostempos dinâmicos, devido à ausência de uma família de isometrias que privilegie um conjunto particular de modos – como as ondas planas em Minkowski –, discriminando aqueles "de frequência positiva". Todavia, analisando os limites em que a métrica tem variações arbitrariamente lentas, é possível escrevermos expansões assintóticas adiabáticas, que estendem de maneira aproximada a noção de modos de frequência positiva e, consequentemente, de estado de vácuo; ademais, tais expansões fornecem um método particularmente útil de renormalização em espaçostempos de FLRW: a subtração adiabática.(2-3). Empregamos então esse método para computar, no estado apropriado de vácuo, o tensor energia-momentum renormalizado de um campo escalar de massa nula conformalmente acoplado à gravidade, mostrando sua autoconsistência com uma dinâmica inflacionária em espaçostempo de de Sitter.

Palavras-chave: Energia de vácuo. Cosmologia. Inflação.

Referências:

1 LINDE, A. D. **Particle physics and inflationary cosmology.** Reading: Harwood Academic Publishers, 1990.
2 BIRRELL, N. D.; DAVIES P. C. W. **Quantum field theory in curved space.** Cambridge: Cambridge University Press, 1982.
3 PARKER L. E.; TOMS,D. **Quantum field theory in curved spacetime**: quantized fields and gravity. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

304

PG142
Efeitos de strain em nanofios politípicos

SIPAHI, G.[1]; SIQUEIRA, A.[1]
sipahi@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Devido a grandes avanços da nanociência, houve grandes progressos nas áreas que envolvem ciência e tecnologia. Entre os avanços, podemos destacar os nanofios devido à sua grande capacidade de utilizações que vão de dispositivos eletrônicos até biossensores. Os nanofios são nanoestruturas semicondutoras unidimensionais que apresentam propriedades intrínsecas a sua baixa dimensionalidade.Em condições de crescimento controladas é possível obter esses semicondutores onde as fases zincblend e wurtzita coexistem. Essa coexistência de duas fases cristalinas é denominada politipismo. O politipismo das fases zincblend e wurtzita em nanofios de compostos III-V, está relacionada a parâmetros como diâmentos do nanofio e a temperatura de crescimento dessa nanoestrutura.(1) A ocorrência do politipismo nessas nanoestruturas, acarreta em diferentes propriedades ópticas e eletrônicas para as fases zincblend e wurtzita. Considerando a direção de crescimento paralela à coordenada z, a variação das fases cristalinas zincblend e wurtzita ao longo da direção de crescimento resulta em regiões de confinamento.Para um cristal na fase wurtzita a direção de crescimento (0001) é paralela à direção z, enquanto que, em um cristal na fase zincblend, nenhum eixo cristalográfico coincide com os eixos cartesianos e assim, a direção de crescimento (001) da fase zincblend não será paralela ao eixo z. Assim sendo, para nanofios politípicos, é conveniente descrever a estrutura zincblend de maneira que sua direção de crescimento coincida com a direção de crescimento da estrutura wurtzita.Neste trabalho, os efeitos de *strain* na descrição das estruturas de bandas de nanofios com politipismo serão estudados usando os hamiltonianos matriciais das fases zincblend e wurtzita, onde o hamiltoniano da fase zincblend será calculado utilizando o método descrito em (2), usando a mesma base usada no cálculo do hamiltoniano da fase wurtzita. Além disso, a direção de crescimento z será rotacionada em torno dos eixo x e y, para analisarmos os efeitos da rotação sobre o *strain* e as estruturas de bandas.

Palavras-chave: Strain. Nanofios. Politipismo.

Referências:

1 DICK,K. A.; CAROFF, P.; BOLINSSON.J.; MESSING, M. E.; JOHANSSON, J.;DEPPERT, K. ; WALLENBERG, L. R.; SAMUELSON, L. Control of iii–v nanowire crystal structure by growth parameter tuning, **Semiconductor Science and Technology,** v. 25, n. 2, p.024009, 2010.
2 PARK, S.H.; CHUANG, S.L. "Comparison of zinc-blende and wurtzitegan semiconductors with spontaneous polarization and piezoelectric field effects," **Journal of Applied Physics,** v. 87, n. 1, p.353–364, 2000.

PG143

Descoberta de inibidores das proteases de SARS-CoV-2: estudos estruturais e planejamento de candidatos a fá´rmacos antivirais

GODOY, M. O.[1]; GODOY, A.[1]; NOSKE, G. D.[1]; FREIRE, M. C. L. C.[1]; NAKAMURA, A.[1]; OLIVA, G.[1]; GUIDO, R. V. C.[1]

mortizdegodoy@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Vi´rus emergentes e reincidentes sempre configurara˜o uma ameaça e um desafio a` sau´de pu´blica global. O surgimento de um novo tipo de coronavi´rus (SARS-CoV-2) em dezembro de 2019 gerou uma epidemia que esta´ em andamento resultando, ate´ o momento, aproximadamente 160.000.000 casos e 3.500.000 mortes.(1-2) Várias vacinas foram desenvolvidas e aprovadas para imunidade em massa, no entanto, algumas precisam ser armazenadas a baixíssimas temperaturas, inviabilizando sua utilização em vários lugares do mundo. Além disso, algumas mutaço˜es no genoma do SARS-CoV-2 podem afetar a eficieˆncia das vacinas. Por esses motivos, faz-se necessa´rio o desenvolvimento paralelo de opço˜es terapeˆuticas para tratamento da infecção. Apesar dos esforços empregados com a atual epidemia e com os surtos passados (SARS e MERS) no desenvolvimento de antivirais, nenhum composto se mostrou eficiente em testes cli´nicos. Assim, este projeto tem como objetivo central utilizar as informaço˜es estruturais de protei´nas de SARS-CoV-2 para auxiliar na busca por mole´culas que possam auxiliar no desenvolvimento de fa´rmacos antivirais. Para isso, protei´nas na˜o estruturais (nsps) envolvidas no processo de replicaça˜o viral, proteases Mpro (nsp5) e PLpro (nsp3) foram clonadas, expressas e purificadas e utilizadas como alvo para a descoberta de inibidores como candidatos a novos fármacos. Ate´ o momento, foram testados 853 compostos de diferentes colaboradores contra as das duas enzimas. Para a PLpro 1% desses compostos mostraram uma taxa satisfatória de inibição (Inibição $>$ 80% à 10μM) e foram selecionados para a determinaça˜o do valor de IC50. Para a Mpro apenas 0,12% dos compostos mostrou inibição satisfatória (Inibição $>$ 80% à 10μM) e foram selecionados para determinação da potência inibitória. Os compostos mais potentes serão direcionados para estudos de cristalização com as proteínas alvo para a determinação do modo de ligação. Esses dados serão úteis para o planejamento de novos derivados mais potentes e seletivos para as proteases de SARS-CoV-2.

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Mpro. PLpro.

Referências:

1 LIPSITCH, M.; SWERDLOW, D. L.; FINELLI, L. Defining the epidemiology of Covid-19 — studies needed, **New England Journal of Medicine,** v.382, n.13,p.1194–1196,2020.DOI:https://doi.org/10.1056/nejmp2002125.

2 FERNANDES, R. S.; FREIRE, M. C. L. C. C. L. C.; BUENO, R. V.; GODOY, A. S.; GIL, L. H. V. G.; OLIVA,G. Reporter replicons for antiviral drug discovery against positive single-stranded RNA viruses. **Viruses,** v.12, n.6, p.598,2020.DOI: https://doi.org/10.3390/v1206059.

PG144

Preprocessing and exploratory analysis of Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) data for diagnosis with immunoassays

BRAZ, D. C.[1]; REDIN, G. G. I.[1]; GONÇALVES, D.[1]; BROLO, A. G.[2]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[1]

dcbraz@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Department of Chemistry, University of Victoria

Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) has been used as an analytical technique that reaches low detection limits for a fast diagnosis of diseases (1), and this can be enhanced if the SERS spectra are analyzed with pattern recognition methods based on machine learning. However, the large number of SERS spectra required to classify highly variable biological samples demands preprocessing strategies for the input in the machine learning algorithms. This work presents the methods to preprocess and explore SERS data acquired from a magnetic immunoassay for detecting human IgM antibodies with nanoprobes fabricated with gold nanoparticles and Nile Blue (Raman reporter). The dataset comprises 60 SERS data equally distributed in 10 human antibody type IgM (antigen) concentrations, viz. 0, 10, 30, 60, 80, 100, 250, 500, 750 and 1000 ng/mL. The SERS data have cubic format, i.e. in each one of the 21 x 21 immunoassay positions (x, y) spaced by 2 μm there is a spectrum with 1021 points ranging from 99 to 898 cm^{-1} Raman shift. The SERS data were represented in a format with 26460 rows (instances) and 1026 columns (features and classes). The exploratory analysis and preprocessing of the spectra were performed in an iterative way. Statistics metrics, data visualization and similarity measures. (2) were used to detect outliers, reduce background noise (3) and determine the spectral regions with the most significant peaks for distinguishability. (2) Four outlier spectra were identified, one of which had an unexpected spike at the Raman reporter band (592 cm^{-1}) and the others had a wide region with 0 intensity. The outliers were removed from the dataset, and a region extending +/- 100 cm^{-1} around the Raman reporter band was selected. The background noise was removed by applying polynomial fitting (degree = 5). Only the spectra with peak at the Raman reporter band were selected. The distance measures between spectra intensities (a.u) for all classes were, in average, about 172k (min. 116k, max. 272k). The preprocessing methods and the exploratory analysis applied to the SERS data will allow for applying pattern recognition methods with machine learning for diagnosis with immunoassays.

Palavras-chave: Preprocessing. Exploratory analysis. SERS.

Referências:

1 FAN, M.; ANDRADE, G.F.; BROLO, A.G. A review on the fabrication of substrates for surface enhanced Raman spectroscopy and their applications in analytical chemistry, **Analytica Chimica Acta**, v. 693, n. 1-2, p. 7-25, 2011. DOI: 10.1016/j.aca.2011.03.002. 2 BEEBE, K.R.; PELL, R.J.; SEASHOLTZ, M.B. **Chemometrics:** a practical guide. New York: Wiley, 1998. 3 BOCKLITZ, T. *et al.* How to pre-process Raman spectra for reliable and stable models? **Analytica Chimica Acta**, v. 704, n. 1–2, p. 47-56, 2011. DOI: 10.1016/j.aca.2011.06.043.

PG145

Caracterização da superfície da calcita através de espectroscopia vibracional não-linear

PALMA, N. B.[1]; MIRANDA, P. B.[1]

nicolau.filho@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

As propriedades ópticas e químicas da calcita (CaCO3) fazem com que esse mineral seja amplamente utilizado em diversas áreas como dispositivos ópticos, agricultura, construção civil, indústria farmacêutica, indústria petrolífera, entre outros. (1) Em diversas dessas aplicações a informação de como os íons Ca+2 e CO3-2 estão organizadas na superfície e como interagem com outras moléculas ou íons desempenha um papel fundamental. Por exemplo, reservatórios de petróleo do pré-sal contêm predominantemente minerais carbonáticos, para os quais a calcita pode ser utilizada como mineral modelo. O entendimento da interação desses minerais com íons da água do mar e com moléculas orgânicas pode contribuir para o aumento da recuperação de petróleo. A espectroscopia vibracional por geração de soma de frequências (SFG) pode trazer informações sobre a natureza química por meio do espectro vibracional e sobre o ordenamento médio das moléculas em uma única monocamada. (2) Esta técnica permite uma investigação direta das moléculas em meios com quebra da simetria de inversão, que ocorre naturalmente em interfaces entre dois meios isotrópicos como gases, líquidos e um grande número de sólidos. Primeiramente realizamos um estudo detalhado da anisotropia e dependência com a polarização do espectro SFG da superfície da Calcita. Foram observadas três vibrações principais na faixa dos estiramentos dos grupos carbonato da superfície, cuja atribuição foi realizada com a ajuda de cálculos por DFT do espectro vibracional da superfície da calcita: o estiramento simétrico em 1069 cm-1, o estiramento assimétrico das ligações CO que interagem com o cristal, e o estiramento CO da ligação que aponta para fora da superfície. A modelagem dos resultados obtidos permite obter informações importantes sobre a estrutura molecular da superfície da calcita, como a orientação dos íons de carbonato na superfície, e servirão de referência para o entendimento de resultados futuros de interação de calcita com água, íons e petróleo. Em seguida foram realizados experimentos de limpeza da superfície com o uso de água com baixa concentração salina em superfícies de calcita modificadas por ácido esteárico, óleo condensado e "óleo morto". Estratégias similares já foram relatadas com solventes orgânicos ao invés do uso de água com baixa salinidade (LSWI). (3) Através de nossos experimentos descobrimos que nem a limpeza com água do mar diluída e nem com água pura foram capazes de remover por completo (até a última monocamada) o óleo adsorvido na calcita. Isso explica o modesto efeito da LSWI e os baixos valores de recuperação total de petróleo (30%) para os reservatórios do pré-sal. Estas informações importantes servirão para estudos posteriores que investigarão como obter uma solução capaz de remover completamente o óleo e desse modo aumentar a recuperação de petróleo.

Palavras-chave: Caracterização. SFG. Petróleo

Referências:

1DUFRESNE, W. J. B. *et al.* Raman spectroscopy of the eight natural carbonate minerals of calcite structure. **Journal of Raman Spectroscopy**, v. 49, n. 12, p. 1999-2007, 2018. 2 SHEN, Y. R. Surfaces probed by nonlinear optics. **Surface Science**, v. 299-300, p. 551–562, 1994. DOI: 10.1016/0039-6028(94)90681-5. 3 YANG, Z. *et al.* Binary solvents with ethanol for effective bitumen

displacement at solvent/mineral interfaces". **Energy Fuels**, v. 29, n. 7, p. 4222-4226, 2015.

PG146

Bose-Einstein condensates and the thin-shell limit in bubble traps

BIRAL, E. J.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; SANTOS, F. E. A.[2]; MÓLLER, N.[3]

eliasbiral@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[3]RCQI-SAS

Bose-Einstein condensation (BEC) is a quantum phenomenon which is nowadays intensively explored both theoretically and experimentally. Such a phase is defined when there is a macroscopic number of particles sharing the same 1-particle quantum state, so that they can be described by one equal quantum wave function. BEC has many interesting properties, but one which stands out is the appearance of a pseudo-potential due to a geometric deformation on the trapping manifold (1) in the thin-shell limit. The true theoretical aspects of this pseudo-potential are somehow related to the curved nature of the manifolds in which the trapping stands in real space. In BEC, the pseudo-potential nature is far from being investigated. With the growing use of cold atoms to design BEC different models and experimental setups have appeared in the literature, in particular, the bubble trap shaped potential has been of great interest (2), due to its fairly easy experimental manipulation. The behavior of pseudo-potentials 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 in the thin-shell limit. The reason RF-dressed potentials are of so much interest for experimentalists is that they are very adjustable and smooth. The high level of control in these experiments allows for the building of many complex trap geometries. The bubble can be produced using a radiofrequency field in an adiabatic potential based on a quadrupole magnetic trap. Here, we used both numerical and direct integration methods for the theoretical investigation of the system. Basically, the direct integration studies consist on the energy minimization in relation to the variation parameters, investigations on expansions of the geometrical quantities and interpretations of the Hamiltonian and its solutions; while the numerical ones are based on the direct result of the time-independent Gross-Pitaevskii equation (GPE) in conjunction with real-time three-dimensional long-scale simulations. (3) In this ongoing work, we have found so far, the Hamiltonian of the system in the thin-shell limit approximation and considered some particular cases such as the perfect sphere geometry for the bubble trap and the Thomas-Fermi approximation. In the current status of this research, we continue questioning the nature of the normal modes' oscillations and its physical properties, which, at this point, we know are geometry-related.

Palavras-chave: Bose-Einstein condensates. Thin-shell limit. Bubble trap.

Referências:

1 MÓLLER, N. S, *et al*; Bose-Einstein condensation on curved manifolds, **New Journal of Physics**, v. 22, n. 6, p. 063059, 2020.

2 HERVE, M. G. **Superfluid dynamics of annular Bose gas**. 2018. Ph D. Thesis(Physique) - Laboratoire de Physique des Lasers, Université Paris, Paris, 2018.

3 CIDRIM A. *et al*; Vortices in self-bound dipolar droplets, **Physical Review A**, v. 98, n. 2, p. 023618,15 Aug. 2018.

PG147

Characterizing complexity of complex networks based on topological heterogeneity

CUNHA, É. F.[1]; COSTA, L. F.[1]

evertonferc@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Studies on complex networks have developed steadily since the onset of network science, around 2000. However, despite the central role in this field, the definition of the concept of 'complexity' remains somewhat elusive. In the present work, we address the key problem of how to measure the complex network complexity. Usually, this characterization has been interpreted relatively to the degree distribution heterogeneity of some network models, specially Erdős-Rényi and Barabási-Albert. While the former model is often characterized by degree homogeneity, being considered a 'simple' model, the latter is known as a 'complex' counterpart, justified by its diversity in degree distribution having both few nodes highly connected, named hubs, as well as the majority number of nodes with low connection. However, it has been shown that the complexity of a network cannot be fully characterized just by the heterogeneity of its degree distribution since it is possible for a network to have all its nodes with the same degree and yet exhibit an entangled topology. (1) In this sense, it becomes necessary to consider other topological measurements in the complexity evaluation. For this reason, to evaluate the overall complexity of a network in a broader way, we propose a measure, the *complex index* (CI), that is derived from the standard deviations of a diverse set of topological measurements. In particular, we use features that can be estimated from nodes and edges of the network. (2) In this work, they include: (i) node degree; (ii) average and (iii) standard deviation of the shortest path length for all pair of nodes; (iv) clustering coefficient of each node; betweenness centrality for (v) nodes and (vi) edges; (vii) matching index for every pair of nodes that shared an edge; (viii) Laplacian eigenvalues; and (ix) second and (x) third hierarchical degree of each node. We are evaluating the CI applied in theoretical network models (Erdős-Rényi, Barabási-Albert, Waxman, Random Geometric Graph and Watts-Strogatz with 10% and 100% of probability rewiring) and in real networks.

Palavras-chave: Complex networks. Complexity. Topological measurements.

Referências:

1 COSTA, L. da F. **What is a complex network CDT-2**. 2018. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/324312765_What_is_a_Complex_Network_CDT-2. Acesso em: 07 out. 2020. 2 COSTA, L. da F. *et al.* Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, Apr. 2007. DOI: 10.1080/00018730601170527

PG148

Investigação das propriedades eletrônicas e estruturais de fotoanodos de Vanadato de Bismuto preparados por spin coating

CORREA, A. S.[1]; GONÇALVES, R. V.[1]

andressacorrea@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A fotossíntese artificial é uma metodologia cuja eficácia para geração de hidrogênio combustível tem sido experimentalmente comprovada e aprimorada desde sua descoberta por Fujishima Honda em 1972.(1) Essa metodologia consiste na utilização de um material semicondutor com características específicas, para o qual a luz solar fornece energia para o processo de quebra da molécula da água, gerando hidrogênio e oxigênio. O BiVO4 é um semicondutor que possui características promissoras para a aplicação em reações fotossintéticas. São elas o band gap adequado (2,4 eV), uma vez que o mínimo seria 1,23 eV, além da fotocorrente teórica de 7,5 mA/cm^2.(2) Entretanto, o alcance desse valor ainda não foi atingido ou relatado na literatura, devido a defeitos estruturais e de transporte de cargas no material. Portanto, ainda há muitos aspectos a serem explorados para corrigir defeitos estruturais e assim melhorar o desempenho desse material como fotocatalisador, reduzindo a ocorrência de recombinação de cargas, seja no interior do fotoanodo ou na interface eletrodo-eletrólito.(3) Neste trabalho, propomos a produção e otimização de fotoeletrodos de BiVO4, por meio do método dos precursores poliméricos e deposição por *spin coating*. Uma das principais vantagens dessa associação entre esses métodos é o baixo custo para produção dos fotoânodos pela independência de equipamentos mais complexos exigidos por métodos como o sputtering. Para produção da resina precursora de qualquer óxido por esta metodologia, são necessários compostos solúveis em água para prover os íons necessários, além de um agente complexante e um polimerizador, os quais são reagentes de baixo custo e fácil acesso. Nessa rota de síntese, após a complexação dos íons solúveis em água com o ácido cítrico, ocorre a formação de um polímero com adição de um agente polimerizante, geralmente etilenoglicol sob temperaturas acima de 100 ºC, ocorrendo eliminação da parte orgânica do material precursor durante o tratamento térmico. No presente trabalho, foi realizado o estudo da influência da temperatura, espessura, taxa de aquecimento e tempo. O estudo da morfologia das superfícies dos filmes de BiVO4 tratados a 450 ºC, 500 °C, 550 °C e 600 °C por meio de análises MEV permitiu o estabelecimento de correlações entre o desempenho fotoeletroquímico dos fotoanodos e as alterações morfológicas observadas. Foram também foram realizadas análises de espectroscopia Raman e difração de raios-X, confirmando a obtenção unicamente da fase cristalina monoclínica, bem como permitindo inferir influência das alterações estruturais na intensidade das densidades de fotocorrente observadas para cada temperatura. Além disso, as estruturas eletrônicas dos filmes de BiVO4 foram estudadas por espectroscopia de fotoelétrons de raios X (XPS), A presença dos íons Bi 3+ e V 5+ foi confirmada para as amostras tratadas a todas as temperaturas pelas análises de XPS, cujos espectros permitiram a identificação dos dubletos característicos dos orbitais 2p do vanádio e 4f do bismuto. O método dos precursores poliméricos mostrou-se um processo eficaz e reprodutível para a obtenção de filmes de BiVO4 capazes de conduzir a divisão fotocatalítica de água, possibilitando a posterior formação de heterojunções com materiais com posicionamento de bandas favoráveis, otimizando o processo de fotossíntese.

Palavras-chave: .Fotossíntese artificial. Spin coating. Método dos precursores poliméricos.

Referências:

1 FUJISHIMA, A.; HONDA, K. Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode. **Nature**, v. 238, p. 37−38, 1972.DOI: https://doi.org/10.1038/238037a0.
2 LI, H. *et al.* Z-Scheme photocatalytic systems for promoting photocatalytic performance: recent progress and future challenges. **Advanced Science**, v. 3, n.11, p.1500389,2016.
3 4.COOPER, J.K. *et al.* Electronic structure of monoclinic BiVO4. **Chemistry of Materials,**v. v.6,n.18,p.5365−5373,2014.

314

PG149

Avaliação dos parâmetros ótimos na inativação fotodinâmica de pneumonia simulando condições humanas.

TOVAR, J. S. D.[1]; KASSAB, G.[1]; BUZZÁ, H. H.[1]; KURACHI, C.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

johandiaz1@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A pneumonia é responsável por altas taxas de mortalidade em todo o mundo, e seu principal tratamento é baseado na antibioticoterapia. A resistência aos antimicrobianos vem aumentando nos últimos anos, resultando em um relevante problema de saúde pública. Uma alternativa promissora ou tratamento auxiliar para a pneumonia é a terapia fotodinâmica antimicrobiana (aPDT). No entanto, há muito ceticismo sobre se será ou não viável fornecer a luz com eficiência para pacientes humanos adultos.(1-3) Para tanto, o objetivo deste estudo foi investigar se o comprimento de onda de 808 nm é capaz de ser transmitido através dos tecidos biológicos da parede torácica e ser entregue com energia suficiente no interior da gaiola para ativar o verde de indocianina (ICG) e promover a resposta fotodinâmica. Um painel de fonte de luz foi desenvolvido composto por 200 lasers centrados em 808nm com um valor médio de irradiância de 77,8 $\pm$ 10,0 mW/cm2 e testado em um modelo de caixa torácica ex vivo. Simulações de Monte Carlo foram usadas para entender a migração de fótons por todo o tecido da parede torácica. Observou-se que os tecidos responsáveis pela maior absorção de fótons são a pele e a gordura subcutânea. A medida experimental da irradiância foi obtida após a passagem de luz ex vivo na caixa torácica de suínos, obtendo-se 3-5% da irradiância emitida. Por fim, observou-se que mesmo com 3% da irradiância inicial, obteve-se com sucesso 3 log ou redução de 99,9% do S. pneumoniae em 42,6 minutos. Em resumo, o uso de ICG + comprimento de onda de 808 nm é um protocolo de tratamento potencial para infecções pulmonares, usando uma iluminação externa.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Terapia fotodinâmica antimicrobiana. Indocianina verde. *Streptococcus pneumoniae*. 808 nm. Laser. Monte Carlo.

Referências:

1 MAISCH, T.*et al.* Anti-microbial photodynamic therapy: Useful in the future? **Lasers in Medical Science**, v. 22, n. 2, p. 83–91, 2007. 2 GERALDE, M. C. *et al.* Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumination: an experimental model. **Physiological Reports**; v. 5, n. 5, p. e13190, 2017. 3 KASSAB, G. *et al.* Safety and delivery efficiency of a photodynamic treatment of the lungs using indocyanine green and extracorporeal near infrared illumination. **Journal of Biophotonics**, v. 13, n. 10, p. e202000176, 2020.

PG150

Study of the mechanism of viral entry inhibitors and SARS-CoV-2 pseudovirus neutralization assay in the BSL2 laboratory

PINTO, F.[1]; SADRAEIAN, M.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]

fabiojr@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

In this first period of activities, we propose to produce and characterize new SARS-Cov-2 pseudotypes for neutralization assays in convalescent plasma and monoclonal antibodies, as well as an inhibition assay of recombinant S proteins, such as ACE2 receptor blockers. The implementation of this methodology already in the first months of activity allowed us to carry out serological tests of vaccine against COVID-19 of a large number of plasma samples in vaccine trials in collaboration with the Laboratory. Neutralization assays to characterize the interaction with cells containing the ACE2 receptor protein and the subsequent internalization of the pseudo-virus were carried out using UV radiation and the photosensitizing action of antibodies complexed with a photosensitizer. We produced for the present study different pseudotypes of viral particles: basically, one containing the Luciferase-IRES-ZsGreen reporter gene, the other containing only the ZsGreen reporter gene, both containing SARS-Cov-2 envelope spike proteins, and a third without spike as a control pseudovirus. The morphological characterization of the pseudovirus particles were performed by transmission electron microscopy and by DLS (Dynamic Light Scattering). Production and characterization of virus pseudotypes with coronavirus Spike fusion proteins (CoV-2) for assays in BSL2 laboratories. (1)

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Pseudotiping lentiviral particles. Neutralization assay.

Referências:

1 CRAWFORD, K. H. D. *et al*. Protocol and reagents for pseudotyping lentiviral particles with SARS-CoV-2 spike protein for neutralization assays. **Viruses**, v. 12, n. 5, p. 513, 2020.

PG151

Mapeamento do campo elétrico em transistores poliméricos por microscopia SFG

SOUSA, M. S.[1]; MIRANDA, P. B.[1]

marcos.silva_sousa@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A espectroscopia por geração de soma de frequência (espectroscopia SFG) é uma técnica poderosa e versátil para estudos de superfícies e interfaces. Ela permite obter o espectro vibracional de moléculas orientadas preferencialmente em interfaces, mas sem contribuição de moléculas com orientação aleatória, tanto na interface como no volume dos materiais. Através da espectroscopia SFG pode-se realizar de forma direta a identificação e determinação da orientação de moléculas específicas. (1) Pelo fato dessa técnica ser intrinsecamente especifica a interfaces, ela pode ser aplicada em dispositivos eletrônicos em que os fenômenos importantes acontecem nas interfaces, como, por exemplo, em transistores por efeito de campo orgânicos (OFETs). Desse modo, com a espectroscopia SFG é possível ter um entendimento completo de como ocorrem os eventos físicos e químicos nos dispositivos OFETs o que é essencial para otimizar o desempenho e durabilidade dos mesmos. Nesse sentido, um tema importante para o entendimento dos mecanismos de funcionamento de OFETs é o mapeamento do campo elétrico na camada dielétrica, que é diretamente proporcional à densidade de carga no canal, e sua comparação com modelos teóricos do funcionamento de OFETs. Esse mapeamento usando a espectroscopia SFG é possível quando a simetria de inversão da camada dielétrica é quebrada por meio da aplicação de um campo elétrico intenso. Portanto, imagens obtidas por microscopia SFG do dispositivo em funcionamento podem mapear o campo elétrico na camada dielétrica dos OFETs, que é proporcional à densidade de carga ao longo do canal. Ela será então comparada a modelos teóricos para o funcionamento de OFETs. (2-3) Tal comparação servirá para validar os modelos teóricos e indicar fenômenos que precisem ser incorporados na descrição completa do seu funcionamento. Com isso esperamos compreender melhor o funcionamento de OFETs e este estudo pode ter implicações importantes para a melhoria do desempenho de dispositivos optoeletrônicos orgânicos.

Palavras-chave: Transistores por efeito de campo. Eletronica orgânica. Espectroscopia SFG.

Referências:

1 LAMBERT, A. G.; DAVIES, P.B.; NEIVANDT, D.J. Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: a tutorial review. **Applied Spectroscopy Reviews**, v. 40, n. 2, p. 103-145, 2005. 2 ZAUMSEIL, J.; SIRRINGHAUS, H. Electron and ambipolar transport in organic field-effect transistors. **Chemical Reviews**, v. 107, n. 4, p. 1296 – 1323, 2007. 3 SCHMECHEL, R. *et al.* A pentacene ambipolar transistor: experiment and theory. **Journal of Applied Physics**, v. 98, n. 8, p. 084511, 2005.

PG152

Análise de chuveiros atmosféricos extensos por meio de simulações

SANT'ANNA JUNIOR, A. B.[1]; SOUZA FILHO, L. V.[1]; MAIA, L. P.[1]

alvarobusquet@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O campo da Astrofísica de Partículas alcançou resultados significativos, tendo se balizado, desde o início, nos conhecimentos das áreas de Astrofísica e Física de Partículas. As primeiras pesquisas que ajudaram a fundar a área ocorreram no final do século XIX e início do XX. Elas consistiam de experimentos realizados com auxílio de balões de ar quente para investigar, em diferentes altitudes, a ionização do ar causada por emissões radioativas. Com a descoberta dos chamados raios cósmicos por Victor F. Hess e a confirmação de que são a causa provável para constante ionização do ar observada em experimentos anteriores, pesquisadores continuaram a pesquisa sobre as características desse fenômeno. (1) Uma das formas de estudar os raios cósmicos, que são partículas muito energéticas, é analisar os chamados chuveiros atmosféricos, os quais são efeito direto da interação dessas partículas energéticas com a atmosfera. Atualmente, as pesquisas de campo dedicadas aos chuveiros atmosféricos são realizadas por meio de grandes colaborações que recebem investimentos de diversas fontes e suporte técnico e profissional de instituições ao redor do mundo, entre elas estão o conjunto de detectores KASCADE - Grande e o Observatório Pierre Auger. (2) O Observatório Pierre Auger é composto de detectores de luz Cherenkov e de luz de fluorescência.O fenômeno conhecido como chuveiro atmosférico é comumente estudado no campo da Astrofísica de Partículas. Ele se caracteriza por uma cascata de partículas subatômicas iniciada pela interação de uma partícula de raio cósmico com as partículas da atmosfera. Essa cascata se desenvolve até que as partículas resultantes atinjam uma energia suficientemente baixa para que a probabilidade de novas interações seja igual à de decaimento em outras partículas mais estáveis, as quais interrompem o processo. Apesar da consistência desse modelo teórico, diversas características dos chuveiros atmosféricos precisam ser mais bem entendidas. Além disso, o estudo desse problema requer uma abordagem estatística, pois há enorme variabilidade entre os possíveis eventos que contribuem conjuntamente para as medidas experimentais. (3) Neste trabalho, desejamos realizar simulações computacionais a fim de comparar os resultados de um modelo simples de ramificação com os de simulações de interação de partículas (CORSIKA) e com os dados obtidos empiricamente. Neste trabalho, iremos simular a cascata de partículas utilizando um modelo de ramificação denominado modelo de Heitler-Matthews mas com a particularidade da distinção de partículas do tipo líder e traço. Desejamos obter características importantes de chuveiros como a profundidade atmosférica e número máximo de partículas na camada crítica. Até a presente data, o código foi desenvolvido para simular a cascata com possibilidade de regulagem de parâmetros tais como o número de partículas de cada tipo e a quantidade de energia recebida por cada. A partir desse código, alguns resultados preliminares foram obtidos. Nos próximos meses, devemos analisar os gráficos resultantes das simulações para os resultados de diferentes valores dos parâmetros mencionados e apresentar as respectivas conclusões na dissertação.

Palavras-chave: Chuveiros atmosféricos. Modelo de Heitler-Matthews. Simulação computacional.

Referências:

1 WALTER, M.; WOLFENDALE, A.W. Early history of cosmic particle physics. **European Physical**

Journal H, v. 37, n. 3, p. 323–358, 2012. DOI: 10.1140/epjh/e2012-30020-1. 2 STANEV, T. **High energy cosmic rays**. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 2010. ISBN 978-3-540-85147-9. 3 BOTELHO JUNIOR, M. V.; MAIA, L. P.; ARBELETCHE, L. B.; SOUZA, V. Semi-analytical model of extensive air showers using branching processes. **Astroparticle Physics** v. 131, p. 102585, 2021. DOI: 10.1016/j.astropartphys.2021.102585.

319

PG153

Generating arbitrary laser beam shapes through phase-mapped designed beam splitting

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

pedro.faleiros.silva@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The ability to have the more accurate wavefront control of a laser beam is important for many research and industry areas, especially for important contemporary problems of modern physics as quantum simulation with cold atoms and optical tweezers experiments to simulate non equilibrium physics. In this project, has been developed a new approach based on Zeroth Order Phase Contrast Technique (1) to generate high definition gray level images by phase-only control of light, being its main advantage the easier practical implementation and facility to improve a directly mapping between the final images and their phase mask, compared to well-known techniques as traditional Holography and Generalized Phase Contrast method. (2) The approach of this project works controlling the splitting of light on axis in thiny regions due the phase contrast between a binary diffraction grating and the target information on a Liquid Crystal Spatial Light Modulator, and uses a 4f-correlator to generate very sharp, speckles-free and smooth images at the target plane. Therefore, it will be presented the procedure to code amplitude information on a laser beam, the high definition images obtained and the application of this approach on a flat-top flatness correction.

Palavras-chave: Optics. Laser. Optical potential.

Referências:

1 PIZOLATO, J. *et al.* Zeroth-order phase-contrast technique. **Applied Optics**, v. 46, n. 31, p. 7604-7613. 2007. 2 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

320

PG154

Associação entre poluição do ar e COVID-19: um estudo envolvendo microscopia confocal e eletrônica

VICENTE, M. L. F.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]; SANTOS, N. V.[2]; VERAS, M. M.[3]; SALDIVA, P. H. N.[3]; PRATAVIEIRA, S.[1]

maria.luiza.vicente@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Faculdade de Saude Publica -USP

[3]Faculdade de Medicina - USP

A transferência deste novo coronavírus para humanos ainda não foi completamente elucidada, porém sabe-se que a transmissão entre humanos é muito rápida e ampla. (1) No último ano, o Grupo de Óptica do Instituto de Física de São Carlos tem colaborado de forma efetiva com pesquisadores do Laboratório Experimental de Poluição do Ar da FMUSP e em conjunto com o projeto "MCTIC / CNPq / FNDCT / MS / SCTIE / Decit nº 07/2020 - Pesquisa para enfrentar o COVID-19, suas consequências e outras síndromes respiratórias agudas graves.", estudamos a localização no corpo humano do material particulado que advém da poluição do ar da cidade de São Paulo e de outras regiões do estado. Do ponto de vista de saúde pública, é muito importante a descoberta de novos fatores que podem afetar significativamente a infecção por COVID-19, como a poluição do ar – um fator ambiental modificável. O Grupo de óptica têm colaborado na caracterização microscópica destas partículas presentes em órgãos humanos e de camundongos expostos à poluição. O material é composto de partículas de forma esférica com aproximadamente 10% de oxigênio e aproximadamente 90% de carbono. Medidas quantitativas com maior precisão podem ser fornecidas por métodos ópticos que auxiliarão em novas investigações; ao contrário do que se pensava anteriormente sobre a natureza do carbono negro (do inglês - *Black Carbon*), essas partículas podem ser entendidas como agregados moleculares, formados principalmente de moléculas de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (do ginlês - *Polycycle Aromatic Hydrocarbons* - PAH) que são formadas a partir de moléculas residuais durante a combustão de motores a gasolina ou a diesel.(2) Novas metodologias foram desenvolvidas no presente trabalho para caracterizar essas nanopartículas. A ressuspensão do material particulado em solução aquosa alcalina, possibilitou uma nova abordagem para medições envolvendo microscopia óptica confocal e Espalhamento Dinâmico de Luz. Na microscopia confocal, foi possível observar os espectros de fluorescência das partículas isoladas, definindo a emissão de luz visível com forte contribuição na região do vermelho. Ao receber excitação óptica por dois fótons (800 nm), foi possível definir um efeito de conversão ascendente de fótons envolvendo a transferência de energia entre estados tripletos de vida longa de duas moléculas diferentes em um agregado molecular, fenômeno conhecido como *photon upconversion*. (3) Além disso, as medidas de DLS corroboraram o tamanho hidrodinâmico observado nas imagens de Microscopia Eletrônica de Varredura, entre 50 nm e 150 nm, sendo possível observar uma maior variação das partículas presentes nas amostras de pulmão. Por fim, imagens de Microscopia Eletrônica de Transmissão foram possibilitadas pela ressuspensão do particulado e geraram um protocolo de preparo de amostra para este material além de revelar sua composição por meio de medidas de EDS. Outro aspecto importante é que essas partículas foram encontradas no cérebro e no bulbo olfatório de camundongos expostos ao ar poluído de São Paulo. Atualmente, estamos estudando os efeitos da citotoxicidade e também da inativação de microrganismos e vírus, como o COVID-19, pela

geração de espécies reativas como o oxigênio singleto por estas partículas de poluição.

Palavras-chave: COVID-19. Carbono negro. PAH.

Referências:

1 LEUNG, C. The difference in the incubation period of 2019 novel coronavirus (SARS-CoV-2) infection between traveles to Hubei and nontravelers: The need for a longer quarantine period.**Infection Control Hospital Epidemiology**,v.41,n.5,p.594-596,2020.
2 SZEWCZYńSKA, M. *et al*. Polycyclic aromatic hydrocarbons distribution in fine and ultrafine particles emitted from diesel ngienes. **Polish Journal of Environmental Studies,**.v.22,n.2, p.553-560,2013.
3 TU, Y. *et al*. Aggregate science: much to explore in the meso world. **Matter**, v. 4, n. 2, p. 338-349, 2021.

322

PG155

Interaction of two fully water-soluble chitosans with bacterial membrane models using Langmuir monolayers

JOCHELAVICIUS, K.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[1]

karen.jochelavicius@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Langmuir monolayers are useful for studying events in a biological membrane at the molecular level. They simulate half of a membrane, and are especially suitable to evaluate the interaction of membrane lipids and other biomolecules, such as proteins, peptides, saccharides, drugs and nanomaterials. (1) Here, we assess the effect of two fully water-soluble chitosans (Ch35% and Ch15%, with degrees of acetylation of 35% and 15%, respectively) on bacterial membrane models, using Langmuir monolayers. These polysaccharides were obtained by Fiamingo *et al.* through the deacetylation and partial reacetylation of chitin molecules, generating molecules with a quasi-ideal random pattern of acetylation. (2) The monolayers were composed by *Escherichia coli* total lipid extract or lipopolysaccharide (LPS). They were deposited on subphases containing either acetate buffer pH 4.5 or PBS pH 7.4, with different concentrations of Ch35% or Ch15%: 0, 10^{-5}, 10^{-3} and 10^{-1} mg mL^{-1}. The incorporation of these chitosans caused monolayer expansion, independently of composition. On acetate buffer, expansion was higher for the Ch15% since it displays a smaller percentage of acetylation, which confers a higher degree of protonation. This chitosan possesses a higher net charge, and therefore the interaction with the negative charges of the monolayer lipids is enhanced. Under these conditions, the interaction was considerably more effective on LPS monolayers. At its highest concentration, Ch35% caused a larger disruption on monolayers on PBS than on acetate buffer. With a lower degree of protonation on less acidic pH, Ch35% occupies a larger volume. It is interesting to point out that the stability and the rigidity of LPS monolayers decreased for the highest concentration of Ch35%, while they increased for the other concentrations and on *E. coli* lipids monolayer. Overall, the results show that the net charge of chitosans molecules may contribute to its action as antimicrobial agents. Even though the interaction with the inner membrane was not strong, the interaction with LPS, which composes the outer membrane, is significant for chitosans with a higher net charge.

Palavras-chave: Langmuir. Bacterial membrane models. Chitosan.

Referências:

1 NOBRE, T. M. *et al.* Interactions of bioactive molecules nanomaterials with Langmuir monolayers as cell membrane models. **Thin Solid Films**, v. 593, p. 158–188, 2015. DOI: 10.1016/j.tsf.2015.09.047.
2 FIAMINGO, A.; CAMPANA FILHO, S. P.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. Tuning the properties of high molecular weight chitosans to develop full water solubility within a wide ph range. **ChemRxiv**, 2020. DOI:10.26434/chemrxiv.11854293.

323

PG156

Avaliação da radiação ultravioleta C e terapia fotodinâmica na descontaminação de órgãos para transplante em modelos in vitro

GAMEZ, Y. M.[1]; VOLLET FILHO, J. D.; INADA, N. M.[1]; BAGNATO, V. S.[1]; KURACHI, C.[1]

ymatosg@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A disponibilidade de órgãos é um fator limitante para o transplante, trazendo como consequência altas taxas de mortalidade dos pacientes cadastrados na lista de espera. A infecção dos órgãos por microrganismos patogênicos cada vez mais resistentes aos antibióticos é uma das causas do descarte de órgãos para transplante devido ao alto risco de transmissão ao receptor e consequentes problemas associados ao paciente. A Radiação Ultravioleta C e a Terapia Fotodinâmica são modalidades estabelecidas para a inativação de microrganismos patogênicos (1-2) sem a possibilidade do aumento da resistência bacteriana. A conjugação Radiação UVC à perfusão ex vivo do órgão pode se tornar uma alternativa para o tratamento de enxertos contaminados (3) aumentando assim a disponibilidade de órgãos na rede de Transplantes. O presente estudo tem como principal objetivo a avaliação da radiação ultravioleta C e a Terapia Fotodinâmica como alternativas para a descontaminação de órgãos infectados por microrganismos patogênicos. Foram realizados testes de inativação bacteriana in vitro usando modelos simulando a perfusão ex vivo do órgão. Foi construída uma câmara de filtragem para simular o órgão e no seu interior foram inseridas membranas simulando as possíveis barreiras que se encontram no interior do órgão que podem reter os microrganismos. Nesse caso foram feitos testes combinando a Radiação ultravioleta C com o uso de antibiótico, mostrando que, após de 60 min de irradiação foi obtida uma inativação de 106 UFC que se encontravam no perfusato circulante e uma energia de entregue de 19 J/cm3, embora, usando o antibiótico por 4 horas conseguiu-se inativar só 101 UFC. Com o intuito de usar a Terapia Fotodinâmica na descontaminação de órgãos foram feitos testes iniciais para caracterizar o Custodiol (líquido de preservação de órgãos) com Azul de Metileno (fotossensibilizador), no entanto, a inativação bacteriana foi apenas parcial. Os mecanismos dessa pobre resposta serão investigados, uma das hipóteses é a de que as biomoléculas presentes no Custodiol atuam como outros alvos da interação do fotossensibilizador e do oxigênio singleto, reduzindo a ação fotodinâmica sobre as bactérias.

Palavras-chave: Radiação UVC. Inativação. Transplante.

Referências:

1 WU, X. *et al.* Ultraviolet blood irradiation: is it time to remember ¨the cure that time forgot¨ **Journal of Photochemistry and Photobiology B**: biology, v. 157, p. 89-96, 2016. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2016.02.007.

2 SOUKOS N. S.; GOODSON, J. M. Photodynamic therapy in de controlo of oral biofilms. **Periodontology 2000**, v. 55, n. 1, p. 143-166, 2011.

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, n. 1, p. 1-12, 2019.

PG157
Superconducting Xmon quantum battery

SANTOS, A. C.[1]; SOUZA, P. J. P.[1]; VILLAS-BOAS, C. J.[1]; HU, C.[2]; YU, D.[2]

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2]Shenzhen Insititute for Quantum Science and Engineering, Southern University of Science and Technology,

In the past few decades, the rapid development of quantum physics and electronics has been making it possible to manufacture and precisely control large and complex quantum systems. Additionally, due to the better understanding of quantum thermodynamics, there is an increasing interest in developing new quantum devices that can be applied to emerging quantum technologies, such as quantum computers, single-photon generators, and devices for quantum metrology. (1) In this direction, the search for quantum devices for storing energy has been increasing and a plethora of systems and methods have emerged. In our ongoing experiment-theory research, we have been studying the experimental realization of a quantum battery based on superconducting qubits. Specifically, we built an artificial three-level atom that works as a battery. (2) Our model explores 1) the Stimulated Adiabatic Raman passage (STIRAP) for transferring the population from the ground state to the second excited one and 2) the bright passage, *i.e.* the one that populates the intermediate state during the population inversion process. In order to improve the efficiency of these processes, we use the Quantum Adiabatic Brachistochrone (3), which is a method based on calculus of variations that finds the most efficient interpolation functions, thereby allowing us to speed up the battery ergotropy injection.

Palavras-chave: Superconducting qubits. Quantum battery. Quantum Brachistochrone.

Referências:

1 YOU, J. Q.; NORI, F. Atomic physics and quantum optics using superconducting circuits. **Nature**, v. 474, n. 7353, p. 589-597, June 2011.
2 SANTOS, A. C. *et al.* Stable adiabatic quantum batteries. **Physical Review E**, v. 100, n. 3, p. 032107, Sept. 2019.
3 REZAKHANI, A. T. *et al.* Quantum adiabatic brachistochrone. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 8, p. 080502, Aug. 2009.

PG158
Estudo da relação entre retenção de íntrons mínimos e câncer

ZUVANOV, L.[1]; MARCO, R.[1]; AMBRÓSIO, A. L. B.[1]
luizazuvanov@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A retenção intrônica (RI), antes considerada como erro de processamento do RNA, possui hoje um papel reconhecido na regulação de expressão em células eucarióticas, de modo que seu descontrole é relacionado com o acometimento de patologias. Em câncer, por exemplo, é observado aumento de eventos de RI e contribuição deste fenômeno para a diversidade transcricional verificada entre diversos cânceres. (1) Ademais, em estudo com seis diferentes tipos de câncer, foi observado que eventos de RI ocasionados por mutações pontuais (SNVs) estão relacionados com a diminuição de expressão de genes supressores de tumor. (2) De fato, a relação de SNVs e RI é também corroborada ao verificarmos que SNVs relacionadas a câncer estão enriquecidas em regiões de sequência canônica de reconhecimento do íntron, com aumento expressivo na base G de sítios de splicing aceptor e de sítios constitutivos. Vimos também aumento no número de SNVs em sequências CpG localizadas em íntrons. Estas observações indicam que SNVs são mais frequentes em regiões funcionais dos íntrons de modo a sugerir que levem a mudanças transcricionais relacionadas à malignização das células. Também, quanto menor o tamanho do íntron, maior a proporção de sequências intrônicas contendo SNVs associadas a câncer. Adicionalmente, observamos que íntron mínimos - uma população de íntrons densamente concentrada próxima ao tamanho mínimo observado na espécie - possuem maior proporção de SNVs descritas por ocasionarem RI em câncer. Estes resultados corroboram com o prévio conhecimento de que íntrons com tamanhos curtos apresentam maior probabilidade de retenção. Nesta linha, nossos resultados são indícios de que mutações nestes íntrons possuem maior probabilidade de se localizarem em regiões funcionais e, portanto, de afetarem o reconhecimento destes. Ademais, verificamos uma correlação negativa entre conteúdo GC de íntrons mínimos e a expressão do gene contendo este íntron em células em divisão. Interessantemente, observamos que genes contendo íntrons mínimos com baixo GC% apresentam maior proporção de oncogenes e genes relacionados a resistência de células malignas a tratamentos. Desta maneira, o estudo de íntrons mínimos se mostra particularmente importante para o entendimento de RI e sua relação a condições cancerosas. Neste contexto, pretendemos investigar a distribuição de mutações em câncer em função do tamanho e conteúdo GC do íntron a fim de verificar possíveis relações com a estrutura deste íntron. Além disso, verificaremos a importância de mutações em grupos CpG em diferentes estados de metilação em íntrons mínimos e estudaremos os destinos de transcritos e proteínas derivadas do fenômeno de RI nestes íntrons. Inicialmente, estudaremos esses parâmetros no câncer de próstata devido a prévia associação de aumento de RI à agressividade e resistência a tratamento. Ademais, análises in vivo demonstram promissor tratamento deste tipo de câncer com uso de modulador de splicing. (3) O câncer de próstata é bastante estudado, de modo que dados de sequenciamento genômico, transcriptômico e outros são facilmente acessíveis, o que torna nossas análises possíveis. Almejamos, assim, contribuir para um maior entendimento da relação da RI com a formação e progressão de cânceres.

Palavras-chave: Íntrons mínimos. Retenção intrônica. Câncer.

Referências:

1 DVINGE, H.; BRADLEY, R.K. Widespread intron retention diversifies most cancer transcriptomes.

Genome Medicine, v. 7, p. 45, Dez. 2015. DOI: 10.1186/s13073-015-0168-9.
2 JUNG, H. *et al*. Intron retention is a widespread mechanism of tumor-suppressor inactivation. **Nature Genetics**, v. 47, p. 1242–1248, Nov. 2015. DOI: 10.1038/ng.3414.
3 ZHANG, D. *et al*. Intron retention is a hallmark and spliceosome represents a therapeutic vulnerability in aggressive prostate cancer. **Nature Communications**, v. 11, n. 1, p. 1-9, Apr. 2020. DOI: 10.1038/s41467-020-15815-7.

327

PG159
Correlações quânticas em sistemas tipo-Dirac localizados

SILVA, C. F.[1]; BERNARDINI, A. E.[1]
caiofernandoesilva@gmail.com

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Os desenvolvimentos da Mecânica Quântica permitiram uma compreensão de fenômenos qualitativamente distintos daqueles descritos por uma formulação puramente clássica. Particularmente, o estudo do emaranhamento quântico como um recurso computacional foi bastante desenvolvido, estabelecendo-se o *framework* da informação quântica. (1) No entanto, grande parte dos resultados discutiram sistemas de qubits descritos em espaços de Hilbert discretos, de modo que cálculos analíticos para medidas de correlação podem ser obtidas para sistemas puros e mistos envolvendo dois qubits. Recentemente, mostrou-se que a equação de Dirac apresenta uma estrutura tensorial que pode ser associada a um sistema de dois qubits e, consequentemente, os biespinores de Dirac tornaram-se, naturalmente, transportadores de qubits emaranhados pelos graus de liberdade contínuos, posição e momentum, como descritos pela equação de Dirac. Esse novo olhar para a equação de Dirac como uma equação de informação quântica posiciona a Mecânica Quântica relativística como um *framework* para o estudo de correlações quânticas, um campo extremamente fértil e relevante para o desenvolvimento da computação quântica. Assim, dado a estrutura de grupos subjacente à equação de Dirac, associada ao spin e à paridade intrínseca, é possível implementar algoritmos para se calcular a correlação intrínsica entre os graus de liberdades discretos associados a essa mesma equação. De fato, correlações intrínsecas não-clássicas podem ser detectadas uma vez que a equação de Dirac para uma partícula livre é generalizada ao se incluir potenciais externos. (2) No entanto, dado que o Hamiltoniano de Dirac é uma matriz que atua nos espinores, e não mais em funções de onda tipo-Schroedinger, é necessário que os potenciais respeitem o grupo de simetrias que subjaz a equação de Dirac, o grupo de Lorentz. Dessa forma, ao se incluir potenciais externos e constantes, é possível então quantificar correlações não-clássicas, como a discórdia quântica e emaranhamento, a partir do formalismo da matriz densidade que codifica as correlações entre os espaços de Hilbert associados ao spin e à paridade intrínseca. No nosso trabalho, pretendemos estender essa abordagem para férmions de Dirac confinados, como por exemplo, por um campo magnético. Uma vez que as componentes espinoriais são modificadas para os conhecidos níveis de Landau relativísticos, o estudo dos espinores à luz da teoria da informação quântica pode ser avançado a partir do formalismo de Weyl-Wigner para espinores no espaço de fases. (3) Essa abordagem permite tratar os biespinores de Dirac como dois qubits correlacionados pelas variáveis do espaço de fases, o que naturalmente introduzirá correlações de spin-paridade locais e também globais.

Palavras-chave: Emaranhamento. Equação de Dirac. Espaço de fases.

Referências:

1 RYSZARD, H. *et al.* Quantum entanglement. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n.2, p. 865, June 2009. 2 BITTENCOURT, V.A.S.V.; BENARDINI, A. E. Global Dirac bispinor entanglement under Lorentz boosts. **Physical Review A**, v. 97, n. 3, p. 032106, March 2018. 3 BERNARDINI, A.E. Phase-space elementary information content of confined Dirac spinors. **Europen Physical Journal Plus**, v.135, n. 8, p.1-20, Aug. 2020.

PG160
Cornering Majoranas

PUPIM, L.[1]; EGUES, J. C.[1]
lucas.pupim@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Following the discovery of higher-order topological phases in topological insulators (1), many scientists in related areas turned their attention to unusual phases as they may foster the emergence of topological corner (and hinge) gapless states in superconductors. Here we consider a quantum anomalous Hall system with proximity-induced topological superconductivity described via a minimal tight-binding model on a 2D lattice. By using a lattice Green function approach and exact diagonalization, we determine the local density of states of the system and its eigensolutions. Our preliminary results show that charge doping can make our model system undergo a higher-order phase transition thus supporting zero-energy Majorana corner modes in our rectangular 2D lattice. We are currently investigating the mechanism behind these findings, as these Majorana corner modes in our minimal model are very interesting per se. (2)

Palavras-chave: Majorana fermions. High order topological phases. Topological superconductivity

Referências:

1 BENALCAZAR, W. A.; BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L. Quantized electric multipole insulators. **Science**, v. 357, n. 6346, p. 61-66, 2017. 2 QI, X-L.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Chiral topological superconductor from the quantum hall state. **Physical Review B**, v. 82, n. 18, p. 184516, 2010.

329

PG161
Correlações gluônicas na rede a temperatura finita

CERQUEIRA, M. C.[1]; MENDES, T. C. R.[1]

matheus.c.cerqueira@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

"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 de 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 a temperatura finita (1), utilizando o parâmetro de ordem da teoria (loop de Polyakov). Este trabalho está utilizando apenas a implementação de um regime de puro gauge (ausência de quarks), estudando mais especificamente o propagador dos glúons utilizando a fixação de gauge de Landau em redes assimétricas (temperatura finita) (2), para melhor compreensão no futuro do comportamento do propagador ao redor da temperatura crítica de transição tanto em SU(2) quanto em SU.(3) A fixação de gauge de Landau no SU(2) e no SU(3), assim como os propagadores do glúon para ambos os grupos, já foram obtidos. Neste momento, o trabalho encontra-se na obtenção de redes maiores, junto com a determinação das massas de blindagem do propagador do glúon. (3)

Palavras-chave: QCD na rede. Temperatura finita. Glúon

Referências:

1 GATTRINGER, C; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice, an introductory presentation**.Berlin: Springer, 2010. 2 KANAYA, K. Lattice results on the phase structure and equation of state in QCD at finite temperature. **AIP Conference Proceedings**, v. 1343, n. 1, p. 57-62, 1964. 3 CUCCHIERI, A.; MENDES T. Eletric and magnetic Landau-gauge propagator in finite-temperature SU(2) gauge theory. **Proceedings of Science**, v. 117, 2010. DOI: 10.22323/1.117.0007.

330

PG162
Informação Quântica e a Gravidade Emergente

BORIN, D.[1]; VANZELLA, D. A. T.[1]
borin@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A teoria quântica revolucionou a física no inicio do século XX pois fez com que olhássemos por uma outra ótica para a natureza revelando a característica probabilística e fundamental da mesma. Desta forma a procura por uma teoria da gravidade que seja compatível com os princípios da teoria quântica tem frustrado gerações de físicos. Entretanto, a abordagem de que de a gravidade não seja de fato uma interação fundamental (1), mas, ao invés disso, emergir como consequência de princípios mais gerais aplicáveis aos sistemas físicos pode apontar para uma profunda inter-relação entre gravidade e conceitos de teoria de informação quântica. (2) Entre esses, a entropia de emaranhamento quântico (3), que caracteriza as correlações entre subsistemas em um sistema mecânico quântico maior, ganha um aspecto especial visto sua relação intrigante com a entropia Bekenstein-Hawking.

$$S_BH = \frac{kc^3}{4G\hbar}A$$

onde k é a constante de Boltzmann, c a velocidade da luz, G a constante gravitacional, $\hbar$ a constante de Planck reduzida e A a área do buraco negro. A entropia de emaranhamento de um buraco negro ser proporcional à área do horizonte do buraco negro nos motiva a questionar de se a entropia de Bekenstein-Hawking é de fato inteiramente a entropia do emaranhamento além de outra possíveis relações e consequências dele.

Palavras-chave: Informação quântica. Gravidade emergente. Emaranhamento.

Referências:

1 VERLINDE, E. On the origin of gravity and the laws of Newton. **Journal of High Energy Physics**, v. 2011, n. 4, p. 029-1-029-26, 2011. 2 SOLODUKHIN, S. N. Entanglement entropy of black holes. **Living Reviews in Relativity** , v. 14, n. 1, p. 8-1-8-96, 2011. 3 AUDRETSCH, J. **Entangled systems** - new directions in quantum physics. Weinheim: Wiley-VCH, 2007.

331

PG163

Optimization of quantum adiabatic evolution through deep reinforcement learning strategies

SANTOS, V. C.[1]; VILLAS-BOAS, C. J.[1]; SANTOS, A. C.[1]

victorcalvello@gmail.com

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

For the past two decades, quantum computing and quantum simulation has been topics of great interest among the scientific community. In part, this interest can be explained when one takes into account the potential technological applications, which exploits the computational power that quantum computing yields. (1) In addition to that, exploring the elementary aspects of quantum systems seems to be a promising path leading towards the understanding of the fundamentals laws that govern the universe we live in. Another rising technology that has been widely employed on a huge variety of fields is Machine Learning (ML). From recommending products and forecasting sales to driving cars and recognizing a person on a picture, the ability of a computer to learn from its own experience has been majorly exploited for the last years. There are many useful tools inside the ML toolbox, and the purpose of this work is to explore some of them within the context of optimizing the adiabatic evolution of a quantum system. The objective of the current work is to optimize a class of processes that describes the time evolution of a given Hamiltonian, subject to a control system driven by external fields, according to an adiabatic protocol. (2) This is a problem of high interest because the systems we are concerned have many potential technological applications, such as quantum batteries and adiabatic quantum computers. In some specific cases, the optimization of such systems can be achieved through functional theory treatment, ending up with analytical expressions for the fields that control the time evolution. However, these specific cases usually involve adding some constraints to the system, which may lead to a solution that is optimal only in that particular configuration. Through Reinforcement Learning (RL) strategies (3), our goal is to build an agent that explores the multiple possibilities allowed for the fields to be applied and learns the best Hamiltonian path, in order to keep the total evolution time as short as possible, without violating the adiabaticity condition. The method proposed is to define the adiabatic evolution of a quantum system in terms of a reinforcement learning task, designing an appropriate state space, a set of actions, and a reward function. Then, some machine learning frameworks such as OpenAI Gym and Tensorflow will be used to build the environment and train the agent, exploring the possibilities of the chosen frameworks. Finally, the agent will be applied in some well known systems, allowing the comparison between RL-designed and analytical solutions.

Palavras-chave: Quantum mechanics. Adiabatic evolution. Optimization.

Referências:

1 NIELSEN, M.A.; CHUANG, I.L. **Quantum computation and quantum information** 10th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. 2 BORN, M.; FOCK, V. Beweis des adiabatensatzes. **Zeitschrift für Physik** , v. 51, p. 165–180, March 1928. 3 SUTTON, R.S.; BARTO, A.G. **Reinforcement learning**: an introduction. 2nd ed. Cambridge: MIT Press, 2018.

PG164

Geração não local de um estado emaranhado entre qbits supercondutores via dinâmica efetiva

OLIVEIRA, E. V. B.[1]; SANTOS, A. C.[1]; VILLAS-BOAS, C. J.[1]

estevao.vbo@gmail.com

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

O paradigma da computação quântica tem sido arduamente debatido ao longo das últimas décadas, sendo a eficiência dos computadores quânticos frente aos computadores clássicos uma das principais preocupações. As propriedades quânticas de superposição, interferência e emaranhamento são, por vezes, os principais agentes contribuintes para tal eficiência, sendo de extrema importância uma análise minuciosa destas, em suas diferentes circunstâncias. Portanto, o presente trabalho tem por finalidade o estudo teórico do emaranhamento não local entre dois qbits, por intermédio de um terceiro, no contexto de dispositivos supercondutores. O circuito quântico supercondutor de interesse é constituído por uma amostra com dois qbits Xmon de frequência fixa, Q_1 e Q_2, e um acoplador do tipo Transmon de frequência ajustável, C, conectando-os.(1) Tendo em vista a complexidade do Hamiltoniano que descreve o sistema no que diz respeito à obtenção de uma solução exata para o problema, será conveniente introduzir uma aproximação por meios da determinação de um Hamiltoniano efetivo para o problema estudado a partir da expansão em primeira ordem da série de Dyson.(2) Assim, a determinação e manipulação dos parâmetros de evolução do sistema, com o objetivo de se gerar o estado emaranhado, é demasiadamente simplificada, resultando em termos cuja a interpretação física é direta. O sistema é iniciado no estado $|Q_1, Q_2, C\rangle = |1, 0, 0\rangle$, e o processo é dividido em duas etapas: i) na primeira, C é colocado em ressonância com Q_1 e o sistema evolui durante um intervalo de tempo t_1, até que estejam maximamente emaranhados; na segunda etapa C é colocado em ressonância com Q_2 e o sistema evolui por um intervalo de tempo t_2, até que estes se emaranhem maximamente. Pela propriedade de monogamia do emaranhamento (3), ao final do processo Q_1 e Q_2 estarão maximamente emaranhados sem a presença de uma interação mútua entre eles, e o estado final gerado será do tipo $\big(|1\rangle_1|0\rangle_2 + e^{i\pi\phi}|0\rangle_1|1\rangle_2\big) \otimes |0\rangle_c$, à menos de uma constante de normalização, em que ϕ é uma fase relativa e o estado composto é separável com relação ao acoplador C. Através de uma simulação computacional do processo descrito acima, realizada levando-se em consideração tanto o Hamiltoniano completo do sistema quanto o Hamiltoniano efetivo, para fins de comparação, esboçou-se a concorrência entre os pares de qbits em função do tempo de evolução. Com a imposição do mesmo ajuste de parâmetros experimentais mostrado em (1) foi possível se obter o estado emaranhado apresentado em um tempo total de $t = 3,41\ ns$ de evolução, consideravelmente inferior ao tempo necessário para sua geração via interação mútua entre Q_1 e Q_2 ($\approx 40\ ns$).

Palavras-chave: Emaranhamento não local. Qbits supercondutores. Dinâmicas efetivas.

Referências:

1 XU, Y. *et al.* High-fidelity, high-scalability two-qubit gate scheme for superconducting qubits. **Physical Review Letters**, v. 125, n. 24, p. 240503-1-240503-7, Dec. 2020.
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, June 2007.
3 COFFMAN, V.; KUNDU, J.; WOOTTERS, W. K. Distributed entanglement. **Physical Review A**,

v. 61, n. 5, p. 052306-1-052306-5, Apr. 2000.

334

PG165

Fenômenos de transporte de uma única molécula através de um nanoporo

ZAGO, L. A.[1]; GUIMARÃES, F. E. G.[1]

leandro.zago@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A produção e a caracterização de nanoporos em membranas tem sido alvo de intenso estudo nas últimas décadas devido a extensiva gama de aplicações, desde a área biológica para estudos de transporte em membranas celulares (1), como na física para dispositivos eletrônicos. Este trabalho contempla a produção e a caracterização de nanoporos através do processo de litográfica eletrônica em membranas de PMMA (Polimetilmetacrilato) de espessuras da ordem de micrometros, e o estudo dos fenômenos de transporte de uma única molécula através do nanoporo. Estas membranas ao serem utilizadas em um sistema eletrolítico possibilitam a produção de um dispositivo sensível a passagem de uma única molécula (2), pois a passagem da molécula através do nanoporo produz uma alteração na corrente eletrolítica estabelecida, deixando um sinal que é característico as propriedades elétricas e morfológicas da molécula de estudo. O estudo da formação dos nanoporos foi realizado variando algumas características do processo litográfico, como a formação de filmes com diferentes pesos moleculares, a exposição ao feixe eletrônico e o tempo de revelação. O formato do nanoporo é uma característica importante ao sistema (3), pois é possível obter respostas elétricas dependentes dessa característica, como seletividade de corrente e retificação.

Palavras-chave: Nanoporo. Molécula única.

Referências:

1 MOAZED, B; HASHEMI, M; ACHENBACH, S. Novel PMMA polymer-based nanopores capable of detection and discrimination between structurally different biomolecules. **IEEE Sensors Journal**, v.14, n.9, p.3292-3309, 2014.

2 TAN, S. *et al.* Detection of a single enzyme molecule based on a solid-state nanopore sensor. **Nanotechnology**, v.27, n.15,p.155502-155513, 2016.

3 PLETT, T. S. *et a*l. Solid-state ionic diodes demonstrated in conical nanopores. **Journal of Physical Chemistry C**, v.121,n.11, p.6170-6176, 2017.

PG166
Transistor quântico em sistema de qubits supercondutores

VELOSO, B. A.[1]; SANTOS, A. C.[1]
brunoavn@df.ufscar.br

[1]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

A computação quântica tem se mostrado um campo extremamente promissor, com diversos avanços nos últimos anos e a promessa de revolucionar a computação, ao aumentar a capacidade de processamento a níveis muito além dos computadores atuais. Entre os principais métodos disponíveis atualmente para a construção destes dispositivos, podemos destacar osciladores anarmônicos construídos em circuitos supercondutores, os chamados qubits supercondutores. Com esta técnica, é possível reunir diversos qubits em um circuito, para realizar operações lógicas.(1) Neste trabalho, propomos um sistema de três qubits supercondutores acoplados entre si, no qual é possível transferir o estado do primeiro qubit (Q_1) para um segundo (Q_2) condicionado ao estado de um qubit de controle (Q_c). Ao deduzir o hamiltoniano efetivo deste sistema, mostramos a capacidade do mesmo de reproduzir o funcionamento de um transistor quântico, com alta fidelidade e bom acordo com os resultados experimentais.Além disto, ao considerar qubits como sistemas de três níveis com anamorticidades, deduzimos um hamiltoniano efetivo capaz de explicar variações de acoplamento em função das dessintonias entre qubits. Tais variações foram verificadas experimentalmente, mas ainda careciam de adequado tratamento e explicação teórica.(2) Estes resultados, revelam uma importância fundamental que os níveis mais excitados do sistema desempenham na dinâmica do mesmo, já que, mesmo sem serem populados, estes estados modificam significativamente o comportamento do sistema.Os resultados obtidos teoricamente apresentam grande acordo com os experimentos e o sistema se mostra promissor para futuras aplicações em processadores quânticos.

Palavras-chave: Computação quântica. Qubits. Supercondutores. Transistor quântico

Referências:

1 KJAERGAARD, M. *et al.* Superconducting Qubits: current state of play. **Annual Review of Condensed Matter Physics,** v. 11, p.369–395, 2020. DOI: 10.1146/annurev-conmatphys-031119-050605.
2 FENG, D.; WANG, D. Quantum Fredkin gate based on synthetic three-body interactions in superconducting circuits. **Physical Review A**, v.101, p.062312, June 2020. DOI: 10.1103/PhysRevA.101.062312.

336

PG167

Alfabetização científica e a natureza da ciência: elaboração de uma sequência didática sobre a física envolvida na pandemia de COVID-19

SARAIVA, E. R.[1]; SILVAI, C. C.[1]

eduardosaraiva@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Percebemos que os currículos de ciências atuais tentam se aproximar da realidade do estudante, porém muitas vezes essas tentativas não obtêm êxito. O conteúdo passado ao aluno de hoje é o mesmo do passado as gerações anteriores, gerando um currículo defasado.A Base Comum Curricular (BNCC) aponta que poucas pessoas são capazes de utilizar conhecimentos científicos para solucionar problemas cotidianos. O que corrobora com a ideia de que as ciências naturais tem que se comprometer com uma alfabetização científica da população.(1)E ser alfabetizado cientificamente é possuir as informações básicas para transitar criticamente no mundo moderno, o que não significa saber tudo sobre ciências, e sim ter um conhecimento variado, suficiente para entender como o seu estudo traz melhorias para a sociedade. O estudante deve conhecer e saber utilizar o vocabulário de ciências de forma adequada para assim compreender seu papel em sua vida, bem como aspectos envolvidos na construção e validação de conhecimentos científicos.(2) Entender a elaboração da ciência, seus métodos e processos, a influência da sociedade na aceitação ou não das ideias científicas é a própria definição de natureza da ciência (NdC). De maneira geral, quando exploramos a NdC em uma aula queremos que o aluno perceba o contexto do conhecimento científico, que ele perceba que a ciência é mutável, influenciada e influenciadora da sociedade.(3) Percebemos, ao analisar materiais didáticos de Ciências da Natureza, que apesar da exigência dos currículos, o tema é abordado quase sempre de forma utilitária, ensinando leis e teorias sem se preocupar com os contextos histórico-sociais, na qual estão envolvidos, fazendo com que grande parte do alunado conclua a educação básica com dificuldades em compreender os processos pelos quais a ciência se dá, sem perceber que ela é feita de hipóteses e que o cientista não é um ser impassível de erros, e que mesmo assim temos boas razões para confiar nos resultados científicos.Muito desta falta de contextualização vem da baixa carga horária que as disciplinas da área de ciências da natureza possuem no ensino médio ou até mesmo a falta de materiais didáticos apropriados. Vemos também uma atenção exacerbada ao vestibular.Dentro do nosso contexto atual, de pandemia de COVID-19, muito se fala sobre a produção de vacinas, comportamento do vírus e seus efeitos ao corpo, eficácia ou não de medicamentos, gráficos e dados de mortalidade. Porém, os alunos tendem a ver essas pesquisas como algo distante, sem ligação com a ciência aprendida em sala de aula.Nosso trabalho, que se encontra em fase inicial, visa aproveitar a situação pandêmica atual para propor uma sequência didática que aborde as ciências da natureza, em especial a física, de forma contextualizada e interdisciplinar, a partir dos eventos cotidianos. Tais como a análise da estrutura do vírus, diagnósticos envolvendo tomografias computadorizadas, confecção de vacinas e até mesmo mensuração de dados. Buscando aproximar o estudante brasileiro, principalmente o da rede pública, com a ciência de alto nível, despertando a curiosidade e mostrando o envolvimento da ciência em seu cotidiano.

Palavras-chave: Ensino de física. Alfabetização científica. Natureza da ciência.

Referências:

1. BRASIL, Ministério da Educação. **Base nacional comum curricular**. Brasília, DF: MEC, 2017
2. SASSERON, L. H.; CARVALHO, A. M. P. de. Alfabetização científica: uma revisão bibliográfica.**Investigações em Ensino de Ciências,** v. 16, n. 1, p. 59–77, 2016. Disponível em: https://www.if.ufrgs.br/cref/ojs/index.php/ienci/article/view/246. Acesso em: 12 jan. 2021.
3 MOURA, B. A. O que é natureza da Ciência e qual sua relação com a História e Filosofia da Ciência?. **Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 7, n.1,p. 32 - 46, 2014.

338

PG168

Estudo da região do Centro Galáctico e busca de sinal de matéria escura com raios gamma

REIS, I.[1]

igorreis@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, matéria escura atua em um papel importantíssimo quando tratamos de cosmologia e de como enxergamos o universo. Já a partir do século 19, muitos artigos científicos faziam alusão a possível existência de matéria escura no universo, adotando esse conceito como forma de tentar solucionar problemas observados em experimentos e contradições com as teorias aceitas na época, e diferentes propostas foram feitas desde então. O significado que temos hoje só foi consolidado de fato por volta da segunda metade do século 20, após observações mais acuradas das curvas de rotação de galáxias e de clusters de galáxias. Com isso, o desenvolvimento da cosmologia e o avanço nas técnicas de simulações numéricas nas últimas décadas no século passado levaram à união entre cosmologia, astrofísica e física de partículas, na busca por entender a natureza dessa matéria, que ao que tudo indicava deveria ser composta por partículas não-bariônicas.(1) Dada a importância de se compreender sua natureza, diversos experimentos surgiram para tentar detectar essas partículas, e a partir daí muitas dificuldades surgiram. Os experimentos se dividem em dois tipos: de detecção direta e de detecção indireta. Meu trabalho lida com os experimentos de detecção indireta, isto é, onde se busca detectar um sinal, no caso de raios gama altamente energéticos, emitido a partir da aniquilação ou decaimento de partículas de matéria escura. Um dos experimentos mais importantes para o meu trabalho é o H.E.S.S., sigla em inglês para Sistema Estereoscópico de Alta Energia, que consiste basicamente de um sistema de imageamento atmosférico composto por telescópios Cherenkov, e é capaz de detectar raios gama cósmicos com energia no intervalo de GeV até TeV do centro galáctico.Como passos iniciais, é importante o domínio de algumas bibliotecas para manipulação de dados, que são muito utilizadas em astronomia e astrofísica, de maneira a simplificar a análise e visualização destes dados. Além disso, se familiarizar com J-Factors, funções que indicam a distribuição de matéria escura num sistema e determinam a intensidade no sinal observado de um processo de aniquilação ou decaimento, já que eles são essenciais para o cálculo do fluxo de raios gama desses processos. Com o avanço do trabalho, vamos passar a coletar, analisar e interpretar os dados das observações do H.E.S.S. (2), permitindo obter resultados e preparar técnicas para análise de dados de experimentos futuros, como o CTA (Cherenkov Telescope Array) e o SWGO (Southern Wide field-of-view Gamma-ray Observatory). Assim, o objetivo deste projeto é investigar e aprender a analisar os dados dos experimentos atuais, de maneira a testar e impor limites às teorias atuais que tentam descrever matéria escura, e além disso as habilidades aqui desenvolvidas irão servir no futuro para os novos experimentos, capazes de observações ainda mais sensíveis, prometendo resultados mais promissores.

Palavras-chave: Astrofísica de altas energias. Astronomia de raios gama. Matéria escura. Centro galáctico.

Referências:

1 LONGAIR, M. S., **High energy astrophysics, by Malcolm S. Longair**, Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2011.

2 ABDALLAH, H. *et al.* Search for dark matter annihilations towards the inner Galactic halo from 10

years of observations with H.E.S.S, **Physical Review Letters**, v.117,n.11, p.111301, 2016.

340

PG169

Desenvolvimento de um microscópio sem lentes holográfico para monitoramento de culturas celulares

D'ALMEIDA, C. P.[1]; PRATAVIEIRA, S.[1]; OLIVEIRA, N. P.[1]; CARVALHO, F. A.[2]; KURAMOTO, C. Y.[2]; KASSAB, G.[1]

camila.paula.almeida@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Escola de Engenharia de São Carlos - USP

A microscopia sem lentes é uma técnica óptica que tem mostrado um grande potencial para o desenvolvimento sistemas de imagem compactos. Além da redução das dimensões desses equipamentos, uma das importantes vantagens dessa técnica é o desacoplamento da relação usualmente existente entre o campo de visão e a resolução do equipamento.(1)Essa técnica óptica abrange diferentes configurações e, dentre elas, montagens que fazem uso da holografia. Neste caso, as imagens gravadas contém informações mais detalhadas da amostra e permitem a recuperação de valores de amplitude e fase da luz a partir da interação desta com os objetos microscópicos observados.(2)Tendo em vista o grande potencial dessa instrumentação, este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um microscópio sem lentes holográfico para o monitoramento de culturas celulares.Para isso, foi construído um sistema compacto (com 20 cm de altura em sua parte mais alta, sobre uma base de 15 cm x 20 cm), fundamentado no princípio da olografia in-line. Desse modo, a luz proveniente de um LED, com emissão centrada no comprimento de onda de 455 nm, que passa por um filtro óptico e um filtro espacial, incide sobre a amostra, posicionada logo acima do sensor de imagem. A informação de intensidade luminosa gravada pelo sensor corresponde, portanto, ao padrão de interferência da luz que é transmitida diretamente pela amostra com a luz que passa interagindo com ela. O padrão gravado possui características bem marcantes da difração, por isso, a teoria da difração é usada como base para os cálculos dos processamentos digitais aos quais as imagens originais são submetidas. Tais processamentos são compostos por duas partes importantes: a focalização e a recuperação dos valores de fase. O primeiro corresponde à propagação digital da imagem gravada até o plano em que se encontra a amostra, enquanto o segundo é o processo que extrai os valores de fase a partir da intensidade da luz gravada nas imagens digitais. Na instrumentação apresentada neste estudo, a recuperação de fase é feita com o uso de seis imagens obtidas a diferentes distâncias entre a amostra e o sensor (com passo de 50 μm).Toda a montagem desse microscópio foi projetada para ter dimensões reduzidas e possibilitar seu uso de uma forma simples. Por isso, o equipamento conta com poucos dispositivos organizados em uma estrutura feita em uma impressora 3D e é conectado diretamente a um computador. Softwares desenvolvidos especificamente para controle da aquisição e processamento das imagens são responsáveis pela automatização do sistema.O microscópio em desenvolvimento já passou por etapas de caracterização de suas imagens de amplitude usando um alvo teste padrão USAF-1951 e imagens de fase, a partir de sua aplicação para observação de células vivas. Atualmente, o equipamento conta com uma resolução de aproximadamente 4 μm e um amplo campo de visão (>20 vezes maior que o campo de visão de um típico microscópio de campo claro com objetiva de 10x) e está em fase de testes para monitorar culturas de células dentro de estufas próprias para o cultivo celular.

Palavras-chave: Microscopia. Instrumentação óptica. Recuperação de fase

Referências:

1 ROY, M.; SEO, D.; OH, S.; YANG, J. W.; SEO,S. A review of recent progress in lens-free imaging and sensing. **Biosensors and Bioelectronics**, v.88, p.130–143,2017..DOI: https://doi.org/10.1016/j.bios.2016.07.115.
2 KIM, S. B. *et al*. Lens-free imaging for biological applications. **Journal of Laboratory Automation,** v.17, n.1, p.43–9,2012..DOI:https://doi.org/10.1177/2211068211426695.

342

PG170

Avaliação da atividade inibitória de Peptídeos diméricos não tóxicos derivados de Bothropstoxin-I na atividade da protease PLpro do vírus SARS-CoV-2

FREIRE, M. C. L. C.[1]; OLIVA, G.[1]; NOSKE, G. D.[1]; OLIVEIRA, V. G. F.[1]; SOUZA, E. P.[2]; NOGUEIRA, V. H. R.[1]; GODOY, M. O.[1]; GODOY, A.[1]; FERNANDES, R. S.[1]; CILLI, E. M.[3]; GUIDO, R. V. C.[1]

marjorie_freire_@hotmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[3]Instituto de Quimica - UNESP

Devido ao cenário atual da pandemia da doença COVID-19, foi mobilizada uma força-tarefa com os membros do nosso laboratório para o projeto "Desenvolvimento de Antivirais contra a COVID-19". Dessa forma, este resumo refere-se a alguns resultados obtidos dos esforços realizados para esse fim, sem prejuízo ao meu projeto principal de doutorado com proteínas do vírus Chikungunya, o qual também encontra-se em andamento.O surto de COVID-19 emergiu em Dezembro de 2019 em Wuhan (China) e rapidamente se disseminou em escala global, afetando a economia e os sistemas de saúde de todo o mundo.(1)O agente causador desta atual pandemia é o SARS-CoV-2, vírus pertencente à família Coronaviridae e que possui material genético do tipo ssRNA(+). O seu genoma codifica 4 proteínas estruturais e 16 proteínas não estruturais que são responsáveis pelos mecanismos de infecção e de replicação viral, respectivamente.(2)Uma das proteínas não estruturais deste vírus, a protease Papain-like (PLpro), conhecida como nsp3, é uma enzima que participa do processamento da poliproteína viral, apresentando um papel relevante na replicação do vírus.(2) Por essa razão, a PLpro surge como um interessante alvo para a busca de moléculas inibidoras, visando o desenvolvimento de antivirais capazes de inibir de forma específica esta protease, interrompendo a replicação do vírus e a sua consequente propagação.Nos últimos anos, a terapêutica baseada em peptídeos tem sido amplamente estudada e desenvolvida para tratar doenças infecciosas, incluindo infecções virais. Tendo em vista que ainda não existem moléculas específicas para o tratamento da COVID-19, o uso de peptídeos inibidores surge como uma perspectiva para o desenvolvimento de tratamentos eficazes. Dessa forma, uma série de peptídeos diméricos sintéticos derivados da região N-terminal da Bothropstoxina-I (3)foram avaliados quanto a sua capacidade inibitória na atividade da PLpro de SARS-CoV-2.Para isso, o gene codificante para a PLpro foi obtido, clonado em vetor de expressão pET-28 e expresso através do sistema heterólogo bacteriano (E. coli). A proteína foi purificada através de métodos cromatográficos e a pureza foi verificada em todas as etapas do processo utilizando eletroforese em gel de acrilamida SDS-PAGE. Ensaios de atividade enzimatica foram realizados com substrato específico e na presença dos peptídeos inibidores. Ensaios de concentração-resposta foram realizados e os valores de concentração inibitória para reduzir metade da atividade enzimática (IC50) foram calculados. Como resultados, o peptídeo líder da série (pBthTX-I)2K e seus derivados demonstraram potências de inibição na faixa micromolar baixa (IC50s = 1,0 - 3,5 μM). O modo de ligação modelado de um peptídeo representativo da série indicou que o composto bloqueou a entrada do substrato PLpro em direção à fenda catalítica da protease. Estudos celulares complementares com culturas infectadas com o vírus estão sendo conduzidos por colaboradores para confirmar os dados de inibição obtidos.Os resultados obtidos até o momento indicaram que os peptídeos diméricos não tóxicos

derivados da Bothropstoxina-I apresentaram atividades inibitórias enzimáticas atrativas, sugerindo que possam ser protótipos promissores para o desenvolvimento de novos fármacos contra a infecção por SARS-CoV-2.

Palavras-chave: SARS-CoV-2. PLpro. Bothropstoxin-I.

Referências:

1 GUO, Y.R. *et al*. The origin, transmission and clinical therapies on coronavirus disease 2019 (COVID-19) outbreak- A n update on the status.**Military Medical Research,**v,7,n.11,p.1-10, 2020.
2 DOMING, A.; GAO. L. Chemistry and Biology of SARS-CoV-2. **Chem**, v.6, p.1283-1295,May 2020 . DOI: 10.1016/j.chempr.2020.04.023.
3 SANTOS FILHO, Norival A., *et al*. Synthesis and characterization of an antibacterial and non-toxic dimeric peptide derived from the C-terminal region of Bothropstoxin-I. **Toxicon,** v.103,p.160-168,2015.DOI:.https://doi.org/10.1016/j.toxicon.2015.07.004.

344

PG171

Seleção de bactérias isoladas de um reservatório de petróleo brasileiro para a produção de biossurfactante: análise da estabilidade de biossurfactante produzido pela linhagem Ar35D5 sob diferentes condições de temperatura, pH e salinidade.

FERREIRA, J. F.[1]; BOSSOLAN, N. R. S.[1]

jakeline.ferreira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes (BS) são compostos de origem microbiana que exibem propriedades surfactantes distribuindo-se em interfaces óleo/água capazes de diminuírem as tensões superficiais e interfaciais. Os BS apresentam potencial de aplicação em vários setores, pois são biodegradáveis, exibem baixa toxicidade e muitos têm atividade a condições extremas de temperatura, pH e salinidades.(1) No setor da indústria petrolífera, esse tipo de composto pode ser utilizado em processos de recuperação terciária do petróleo (MEOR). Dentre as linhagens bacterianas isoladas de amostra de rocha reservatório de petróleo e testadas no presente trabalho, a linhagem Ar35D5, identificada como Bacillus alveayuensis, foi selecionada para continuidade de estudos de crescimento e produção de BS. Na etapa anterior, concluiu-se que o cultivo em Meio Mineral, utilizando as fontes de sacarose e ureia na relação C/N 2/1, incubado à 55°C, favoreceu a produção de BS. Estabelecida esta condição, como próximo passo, buscou-se avaliar a estabilidade do BS produzido em diferentes intervalos de temperatura, pH e salinidade, simulando variações possíveis de serem encontradas em reservatórios de petróleo. Bacillus alveayuensis foi cultivada em Meio Mineral, na condição otimizada, durante 144 horas. Após este período foi realizada a extração do BS pelo método da precipitação ácida, com posterior secagem por liofilização; esta fração do BS foi denominada BS bruto. Soluções de BS bruto na concentração de 0,1% (m/v) foram preparadas para os ensaios de estabilidade. As amostras foram mantidas por 24 horas nas temperaturas de -18 (em congelador), 4 (em refrigerador), 25, 40, 55, 65, 80 e 100°C (em estufa bacteriológica). Para os ensaios sob diferentes valores de pH, as amostras tiveram seu pH ajustado para 2, 4, 6, 7, 8, 10 ou 12 (utilizando HCl ou NaOH 1M). Para os ensaios do efeito da força iônica, as amostras tiveram sua salinidade ajustadas em 0, 3, 6, 9, 12 ,15, 18 e 21% (m/v), a partir da adição de NaCl. Em todos os ensaios de estabilidade do BS bruto foram realizadas medidas do índice de emulsificação (E24), em triplicatas, e medidas da tensão superficial (TS), utilizando o tensiômetro automático (modelo Sigma 700, marca Attension). Os resultados exibiram elevados índices de emulsificação do BS, independentemente das condições térmicas, com valor máximo em 55°C (E24 65,67±1,13%) e mínimo em 4°C (E24 62,32±0,82%); os valores máximo e mínimo de TS foram observados em -18°C e 121°C (46,07 e 38,35 mN.m-1, respectivamente). Sob diferentes valores de pH, pouca variação ocorreu nas medidas de E24 e TS. Os valores observados máximo e mínimo foram: E24 66,67±2,62% (pH 6) e 64,63±1,94% (pH 10); TS 52,86±0,27% (pH 12) e 47,26 mN.m-1 (pH 8). Por fim, os testes do BS em diferentes salinidades apresentaram alterações com maior valor de E24 67,94 ±0,43% na salinidade de 6%; os valores de TS apresentaram pouca variação, sendo a maior redução observada na salinidade de 9%, que foi de 45,66 ±0,44 % mN.m-1. Os resultados revelaram que o BS bruto produzido pela linhagem Ar35D5 manteve as propriedades tensoativas sob diferentes condições de temperatura, pH e salinidade, mostrando-se promissor para o uso em MEOR.

Palavras-chave: Biossurfactante. Bacillus alveayuensis. Emuslificante. MEOR.

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.

PG172

Avaliação do tratamento combinado da terapia fotodinâmica e ação enzimática na inativação de biofilmes bacterianos

NAKADA, P. J. T.[1]; ALVES, F.; POLIKARPOV, I.[1]; KURACHI, C.[1]

paulo.nakada@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS), a resistência antimicrobiana é um dos principais problemas de saúde global. A resistência antimicrobiana ocorre naturalmente, no entanto o uso indevido de antibióticos pode acelerar esse processo. Além disso, a formação e estabelecimento de biofilmes bacterianos aumenta ainda mais a tolerância aos diversos tratamentos, uma vez que os microrganismos estão inseridos em uma matriz extracelular que impossibilita a permeabilidade dos agentes antimicrobianos, gerando outro desafio para o controle bacteriano.(1) Uma das alternativas para esse problema, é a utilização da terapia fotodinâmica (TFD) que é uma terapia antimicrobiana conceituada, segura, eficaz e que não gera resistência antimicrobiana comprovada, além de possuir um amplo espectro de ação em comparação com os antibióticos. No entanto, a permeabilidade dos fotossensibilizadores em biofilmes é bastante precária devido à barreira física que constitui o biofilme. Com a finalidade de melhorar a distribuição e permeabilidade do fotossensibilizador em biofilmes e, consequentemente, aumentar a inativação de biofilmes de *Pseudomonas aeruginosa* e *Streptococcus pneumoniae*, o foco deste estudo será usar enzimas capazes de degradar a matriz do biofilme para tornar as bactérias mais acessíveis aos fotossensibilizadores. Primeiramente, será feito um tratamento enzimático (com enzimas selecionadas e sintetizadas pelo Grupo de Biotecnologia Molecular – IFSC/USP coordenado pelo Prof Igor Polikarpov) para degradar a matriz do biofilme e, então a TFD será aplicada. Alguns fotossensibilizadores serão testados e selecionados de acordo com a maior efetividade, dentre eles temos a Indocianina Verde (ICG, Oftalmos, Brasil) e a curcumina. Como a composição da matriz do biofilme é bastante complexa e variada será realizado um screening com algumas enzimas que atuam em polissacarídeos.(2) No momento, as enzimas que estão em fase de teste são: GH20, que é membro do grupo acetilglucosaminidase e cliva as ligações beta-1,6-N-acetilglucosamina presentes nos polissacarídeos; GH16, membro do grupo das laminarinase que cliva as ligações glicosídicas beta-1,3 e beta-1,4; GH13 que é membro do grupo da glucosidase e cliva as ligações alfa-1,6 glicosídicas também presentes nos polissacarídeos; Esterase (Est), enzima que cliva preferencialmente o substrato 4-Nitrofenil Octanoato que é um peptídeo, além disso, as esterases têm propriedades emulsificantes; Endoglucanase que cliva ligações glicosídicas beta-1,4 em sítios aleatórios não cristalinos da cadeia de celulose; CTEC celulase que é membro da família da glicosídeo hidrolase e é produzida por vários micróbios celulolíticos, este coquetel enzimático comercial contém celulases, beta-glucosidases e hemicelulase para a aplicação da degradação da celulose a açúcares fermentáveis. Após a seleção da enzima mais eficaz em degradar a matriz dos biofilmes, serão realizados os testes com a TFD para inativar os microrganismos. Para fins de comparação com a TFD, os antibióticos padrões para cada espécie bacteriana serão usados como referência.

Palavras-chave: Biofilme. Tratamento enzimático. TFD.

Referências:

1 AZEREDO, J. *et al.* Critical review on biofilm methods. **Critical Reviews in Microbiology,** v. 43, n. 3, p. 313–351, May 2017. DOI:10.1080/1040841X.2016.1208146.

2 BAKER, P. *et al.* Exopolysaccharide biosynthetic glycoside hydrolases can be utilized to disrupt and prevent *Pseudomonas aeruginosa* biofilms. **Science Advances**, v. 2, n. 5, p. e1501632,May 2016. DOI:10.1126/sciadv.1501632.

PG173

Interação quark-antiquark em ordens altas e a massa do quark top

LONDON, C. Y. M.[1]; BOITO, D.[1]

cristiane.london@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A energia de interação entre um par quark-antiquark pesado é uma quantidade fundamental da Cromodinâmica Quântica, sendo essencial para o estudo das propriedades da QCD no limite não-relativístico. O potencial $q\bar{q}$ estático está atrelado a diversos processos físicos e sua descrição precisa pode revelar desvios pequenos na teoria e apontar direções na busca por nova física. Neste trabalho pretendemos compreender a série perturbativa do potencial quark-antiquark em ordens altas na QCD, atualmente conhecida até terceira ordem no acoplamento forte α_s.(1-2) Para isso, vamos primeiro analisar as correções de primeira ordem do potencial e posteriormente estudá-las no chamado limite large-β_0 da QCD. Nesse limite, a série perturbativa é conhecida em todas as ordens de α_s e os termos do tipo $\alpha_s^n N_f^{n+1}$ correspondem aos da QCD exata.(3) Com esse estudo detalhado do potencial estático, poderemos analisar a relação da seção de choque de eletroprodução de quarks $t\bar{t}$ com a escala de renormalização a ordens altas na QCD e assim aumentar a precisão na determinação da massa do quark top, aprimorando a extração dessa massa em colisores e^+e^- (como o futuro FCC-ee).

Palavras-chave: Potencial quark-antiquark. Massa do top.

Referências:

1 SMIRNOV, A. V.; SMIRNOV, V. A.; STEINHAUSER, M. Three-loop static potential. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 11, p. 112002, 2010.
2 ANZAI, C.; KIYO, Y.; SUMINO, Y. Static QCD potential at three-loop order, **Physical Review Letters**, v. 104, n. 11, p. 112003, 2010.
3 BENEKE, M. Renormalons. **Physics Reports**, v. 307, n. 1-2, p. 1-142, 1999.

349

PG174

Bases estruturais do mecanismo de maturação da enzima Main Protease (Mpro) do vírus SARS-CoV-2

NOSKE, G. D.[1]; GODOY, A.[1]; OLIVA, G.[1]; NAKAMURA, A.[1]; OLIVEIRA, V. G. F.[1]; FERNANDES, R. S.[1]; LIMA, G.; ROSA, H. V. D.[1]; PEREIRA, H.[1]; ZERI, A. C. M.[2]; NASCIMENTO, A. S.[3]; FREIRE, M. C. L. C.[1]

gabriela.noske@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]CNPEM

[3]Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

O vírus SARS-CoV-2 é o agente causador da COVID-19, uma doença infecciosa altamente contagiosa responsável pela pandemia que teve início em março de 2020. (1) O genoma viral contém uma ORF (ORF1ab), que codifica duas poliproteínas (pp1a e pp1ab) contendo proteínas não-estruturais do vírus, essenciais para sua replicação. Uma das proteínas não estruturais, a enzima nsp5 Mpro é pertencente à família das cisteíno proteases, possui estrutura dimérica e é responsável pela clivagem das poliproteínas virais em 11 sítios, auxiliando na liberação das proteínas virais maduras.(2) Dada sua importância no ciclo de replicação, é evidente que ela representa um importante alvo no planejamento de potenciais candidatos antivirais, sendo uma das proteínas de SARS-CoV-2 mais estudadas, possuindo diversas estruturas cristalográficas resolvidas. No entanto, seu processo de maturação ainda permanece pouco caracterizado.(3) Desta forma, o objetivo principal deste projeto é a elucidação deste mecanismo, além da busca por inibidores. Inicialmente, amplificamos a região codificante da Mpro utilizando como molde o cDNA viral, gentilmente cedido pelo Dr. Edison Durigon (ICB-USP). A sequência amplificada foi clonada no vetor de expressão pET_M11, em três construções diferentes: uma forma imatura da enzima (IMT Mpro), uma forma nativa (Mpro) e um mutante inativo (C145S Mpro) que contém a sequência de auto-clivagem da enzima na região N-terminal. Ambas as proteínas foram purificadas e cristalizadas. A coleta de dados foi realizada na linha MANACA, no SIRIUS e a resolução da estrutura feita utilizando o método de substituição molecular. Realizamos também a caracterização em solução das enzimas, a partir de ensaios de atividade baseados em FRET e determinação dos estados oligoméricos por SEC-MALS. Por fim, a enzima IMT Mpro foi utilizada para realização de um fragment screening. A estrutura cristalográfica desta forma imatura da enzima revelou uma série de mudanças estruturais comparada a forma nativa, incluindo seu sítio de ligação ao substrato. Além disso, mostrou atividade significativamente reduzida e monomérica em solução, em contraste com a enzima nativa. Como resultados do fragment screening, obtemos diversas estruturas em complexo com fragmentos, incluindo um deles da interface dimérica, sítio este que ainda não havia sido descrito. Também obtivemos a estrutura da enzima C145S Mpro, que se apresentou em complexo com ambas as regiões N e C-terminal de reconhecimento da enzima, demonstrando que o mutante ainda possui atividade catalítica residual e foi capaz de realizar a auto-clivagem de seu peptídeo N-terminal. Por sua vez, o peptídeo C-terminal é proveniente de uma cadeia relacionada por simetria. Esta construção em solução, relevou conter uma mistura dos estados oligoméricos monômeros, dímeros, trímeros e tetrâmeros. Assim, propusemos um mecanismo de maturação para a enzima, que tem início com a formação de um dímero intermediário para clivagem da região N-terminal, seguida da associação de dois dímeros para remoção do C-terminal, resultando

na liberação da enzima madura. A elucidação deste mecanismo possibilita o planejamento de inibidores tendo como alvo etapas intermediárias da maturação da enzima. Nas próximas etapas realizamos a triagem de inibidores, tal como obtenção de complexos e otimização destes, utilizando as informações estruturais obtidas.

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Main-protease. Maturação

Referências:

1 ZHU, N. A novel coronavirus from patients with pneumonia in China, 2019, **New England Journal of Medicine**, v. 382, p. 727–733, 2020. DOI:10.1056/NEjMoa.2001017.
2 ZHANG, D.L.*et al,* Crystal structure of SARS-CoV-2 main protease provides a basis for design of improved a-ketoamide inhibitors,**Science**, v. 368, n.6489,p. 409–412, 2020.
3 XIA,B. ; KANG,X. Activation and maturation of SARS-CoV main protease,**Protein Cell**, v. 2, n.4,p. 282–290, 2011.

351

PG175
Soluções compactas para gravidade escalar-tensorial

CONSOLE, F.[1]; HARTMANN, B.[1]
felipe.console@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

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 teoria da Relatividade Geral não pode ser a palavra final no que diz respeito à gravidade. Entre esses motivos encontram-se as misteriosas matéria e nergia 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.(1) 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. Temos como objetivos, neste trabalho, estudar soluções das equações de teorias escalar-tensoriais da gravidade que descrevem buracos negros ou objetos compactos como as estrelas de bosons.

Palavras-chave: Gravidade. Teoria escalar-tensorial. Soluções compactas.

Referências:

1 BERTI, E. *et al.*Testing general relativity with present and future astrophysical observations,**Classical Quantum Gravity,**v.32,p.243001,2015. DOI:10.1088/0264-9381/32/24/243001.

352

PG176

Correlação condicional passado-futuro de um reservatório de defasagem não-Markovianos controlado

RODRIGUES, N. E.[1]

naruna@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Física é uma ciência que flerta constantemente com a ideia de um sistema ideal, comumente denominado de sistema fechado, o qual não sofre com interações com o meio externo (ambiente).(1) No entanto, a realidade é bem diferente, uma vez que no mundo real não existem sistemas completamente fechados. Então, quando se pensa no regime clássico muitas vezes tenta-se modelar essa influência do meio externo a partir de uma variável estocástica (que com o passar do tempo essa variável assume valores randômicas), o que pode fazer com que a evolução do sistema seja Markoviana (sem memória), se esse for o caso isso significa que o processo estocástico depende apenas do estado presente e não dos eventos passados. Por outro lado, os efeitos de memória podem ser estudados a partir da correlação condicional passado-futuro, de tal forma que se tivermos um processo Markoviano clássico eventos passados e futuros são estatisticamente independentes quando condicionados a um estado fixo intermediário. Ademais, se a evolução for local no tempo ela é descrita por equações mestra ou a equação de Fokker-Planck, como por exemplo o movimento browniano. Por outro lado, no regime quântico, o operador densidade é capaz de descrever a interação com o ambiente ao seu redor, o que pode levar a dissipação de energia ou a decoerência (2), a partir de sua estrutura de Lindblad (local no tempo), que é capaz de descrever a dinâmica de sistemas quânticos abertos. Nesse contexto, por muito tempo se acreditou que a Markovianidade estava ligada à equação de Lindblad. Porém, recentemente foi sugerido que efeitos de memória, ou não-Markovianidade, quebram a independência condicional passado-futuro. Sendo assim seria possível estabelecer uma Markovianidade clássica e quântica baseada em um sistema composto por três eventos aleatórios que são ordenados temporalmente. Dessa forma, uma dinâmica quântica seria considerada Markoviana se para um processo de medida arbitrário a correlação de independência passado futuro não fosse quebrada (3) caso contrário seria não-Markoviana. Portanto, o objetivo desse trabalho é encontrar essa correlação condicional passado-futuro para um sistema quântico de dois q-bits acoplados entre si com um deles ligado a um banho de defasagem. A dinâmica desse sistema preservaria a energia do sistema intacta, de tal forma a interferir apenas nas coerências, que são os termos fora da diagonal principal do operador densidade, visto que está submetida à um banho de defasagem. Sendo assim, através desse modelo se espera conseguir controlar a transição do Markoviano para o não-Markoviano.

Palavras-chave: Não-Markovianidade

Referências:

1 MOREIRA, V. S. *et al* Enhancing quantum transport efficiency by tuning non-Markovian dephasing. **Physical Review A**v.101, p.012123, 2020. DOI: 0.1103/PhysRevA.101.012123.

2 BRITO, F.; WERLANG, T. A knob for Markovianity. **New Journal of Physics,**v.17,p.072001, July 2015.DOI: 10.1088/1367-2630/17/71072001.

3 BUDINI, A. A. Conditional past-future correlation induced by non-Markovian dephasing reservoirs. **Physical Review A,** v.99, p.052125, 2019. DOI: 10.1103/PhysRevA.99.052125.

PG177

Modelo de infecção bacteriana em Membrana Corioalantóica para avaliação da Inativação Fotodinâmica em tempo real

FERREIRA, G. C.[1]; BUZZÁ, H. H.[1]; KURACHI, C.[1]; INADA, N. M.[1]; TOMÉ, A. J. B.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

giane.ferreira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A pneumonia é uma doença infecciosa do pulmão e, geralmente, é causada por bactérias, como a Streptococcus pneumoniae, Klebsiella pneumoniae, entre outras. Com o aumento de bactérias resistentes a antibióticos, há a necessidade de estudar novas terapias para o tratamento dessa doença. A Inativação Fotodinâmica (IFD) é uma terapia que se baseia no uso de um fotossensibilizador (FS), que fica acumulado no patógeno de interesse e, quando há aplicação de luz no comprimento de onda adequado, leva à formação de espécies reativas de oxigênio, que são tóxicas para a célula alvo. Essa técnica vem mostrando ser uma opção aos tratamentos infecciosos, especialmente para bactérias resistentes, pela baixa probabilidade de surgimento de resistência bacteriana. Para ser possível estudar, em tempo real, a entrega e especificidade do FS no pulmão e os possíveis danos causados à vasculatura local, é necessário buscar novos modelos experimentais para preencher a lacuna entre estudos em modelo animal e in vitro. Um modelo já muito utilizado na literatura para estudo de efeitos vasculares é o modelo de Membrana Corioalantóica (CAM) em ovos de galinha. Devido à similaridade entre o tecido vascularizado pulmonar e a membrana corioalantóica, sendo os dois órgãos respiratórios, o modelo CAM pode mimetizar uma infecção bacteriana em tecidos altamente vascularizados do pulmão.(1-2) Sendo assim, este trabalho tem como objetivo estabelecer um modelo de infecção bacteriana em CAM para avaliação em tempo real da Inativação Fotodinâmica utilizando diferentes fotossensibilizadores, incluindo nanoemulsões. A partir disso, será possível estipular os melhores parâmetros de concentração, tempo de incubação e dose de luz para obter a melhor eficácia terapêutica.

Palavras-chave: Inativação fotodinâmica. Pneumonia. Nanoemulsões. Porfirina. aPDT.

Referências:

1 RUDGER, A. *et al.* The avian chorioallantoic membrane in ovo - a useful model for bacterial invasion assays. **International Journal Medical Microbiology**, v. 292,n.3-4, p.267- 275 ,2002.

2 WARNICKE, P.;FINK, S. ;WEGAND,C., HIPLER,U. C.;FISCHER, D. A shell-less hen's egg test as infection model to determine the biocompatibility and antimicrobial efficacy of drugs and drug formulations against Pseudomonas aeruginosa. **International Journal of Pharmaceutics,** v.585, p.119557,2020.DOI:10.1016/j.ijpharm.2020.119557.

PG178

The crystal structure of Bl_Ylmd a putative multifunctional purine nucleoside enzyme YfiH-like from Bacillus licheniformis

ALMEIDA, L. R.[1]; ROSA, H. V. D.[1]; GREJO, M.[1]; SANTOS, J.[2]; BERNARDES, A.[1]; MUNIZ, J. R. C.[1]
al_leo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Ciências Biomédicas - USP

The mesophilic bacteria *Bacillus licheniformis* has demonstrated great potential for industrial enzyme production, due to its high capacity to secrete proteases. (1) Based on proteomics and sequences analysis, a hypothetical protein CNF1/YfiH-like putative cysteine hydrolase from *B. licheniformis* (*Bl*_YlmD) drew attention because of their sequential similarities with well-known laccases domains and became the object of study in this research. We have heterologous expressed, purified *Bl*_YlmD and had its crystal structure determined at 2.6 Å resolution. *Bl*_YlmD is classified as an α/β protein that forms four layers of $\alpha/\beta/\beta/\alpha$ with mixed antiparallel beta-sheets and assembles into a dimer in the asymmetric unit. We applied bioinformatics tools to identify seven proteins in different organisms with reasonable sequence identity and structural homology to the CNF1/YfiH-like superfamily. Collectively, these sequences are assigned to the domain of multi-cooper polyphenol oxidoreductase laccase (PF02578 Cu-oxidase_4) and domain of the unknown function (DUF152). A comparative analysis of *Bl*_YlmD and its homologous structures showed that they share the hypothetical catalytic dyad, proposed for CNF1/YfiH-like putative cysteine hydrolases superfamily, which are Cys132 and His149 residues centrally positioned in the opened cavity revealed by *Caver 3.0*, a structural similarity that can be observed in these hypothetical proteins. Thus, the pathway accessibility and characteristic cysteine-histidine dyad representing the hypothetical catalytic domain from several bacterial cytotoxic necrotizing factor (CNF) proteins and the related dermonecrotic toxin (DNT) or to a peptidoglycan editing factor (PgeF).(2) Zinc ions are often present in structures of this superfamily, as with *Bl*_YlmD where two zinc ions are observed adopting tetrahedral coordination to cysteine residues. Recently, it was demonstrated that the Ylmd protein from *Geobacillus stearothermophilus* (PBD: 6T1B; 6T0Y, 55.38% identity) is able to phosphorolytically cleave adenosine into adenine and ribose-1 phosphate.(3)This protein, whose structure was obtained in complex with an inosine molecule as a ligand in the active region, refers to the C-terminal portion or DUF152 domain of the purine nucleoside phosphorylase (LACC1 gene) from *Homo sapiens*, also known as FAMIN (Fatty Acid Metabolism-Immunity Nexus), and which is strongly correlated with human disease. This truncated portion called FAMIN176 by the authors shares homology with other bacterial orthologs and contains several catalytic activities mentioned, functioning as: adenosine deaminase (EC 3.5.4.4), purine nucleoside phosphorylase (EC 2.4.2.1) and methylthioadenosine phosphorylase (EC 2.4.2.8). In the present work we carried out the discussion around some of the structural features related to these proteins, in purpose to compare catalytic pockets and ligand binding motifs.

Palavras-chave: Putative protein. Crystal structure. Bacillus licheniformis. PUFs .YlmD.

Referências:

1 DEGERING, C.; EGGERT, T.; PULS, M.; BONGAERTS, J.; EVERS, S.; MAURER, K.-H.; JAEGERr,

K.-E. Optimization of protease secretion in *Bacillus Subtilis* and *Bacillus licheniformis* by screening of homologous and heterologous signal peptides. **Applied Environmental Microbiololgy**. v.76 ,n.19, p.6370 LP – 6376,2010. DOI: https://doi.org/10.1128/AEM.01146-10.
2 PARVEEN, S.; REDDLY, M. Identification of YfiH (PgeF) as a factor contributing to the maintenance of bacterial peptidoglycan composition. **Molecular Microbiology,** v.105, n.5, p.705–720,2017. DOI: https://doi.org/10.1111/mmi.13730.
3 CADER, M. Z.*et. al.* FAMINis a multifunctional purine enzyme enabling the purine nucleotide cycle. **Cell**. v.180, n.2, p.278-295.e23,2020. DOI: https://doi.org/10.1016/j.cell.2019.12.017.

356

PG179

Modelos de docking e dinâmica molecular para a determinação do enantiômero ativo na inibição da polimerização de tubulina

SALCEDO, D. L. P.[1]; ANDRICOPULO, A. D.[1]

palomino@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os microtúbulos, filamentos formados pela polimerização de $\alpha\beta$-tubulina, são um componente básico do citoesqueleto das células eucarióticas e desempenham um papel crucial na formação do fuso mitótico durante a divisão celular.(1) Assim, eles são um alvo molecular atraente para o desenho de novos agentes anticâncer.(2)Compostos que se ligam aos microtúbulos podem desestabilizar sua dinâmica e induzir a apoptose. Anteriormente determinamos a atividade biológica, frente a polimerização de $\alpha\beta$-tubulina, de uma série de compostos derivados de acrididona que possuem um centro quiral, o que gera dois possíveis enantiômeros.(3) Foi identificado que só um dos enantiômeros de cada molécula seria ativo na inibição da polimerização da tubulina. Neste trabalho, usando as técnicas de docking e dinâmica molecular, foram modeladas as possíveis interações dos dois enantiômeros do composto mais ativo da série, 1a (enantiômero S) e 1b (enantiômero R), com o dímero da αIβII-tubulina. Primeiro, cálculos de ensamble docking foram realizados usando as estruturas com PDB ID 1SA1, 4O2B, 5EYP, 5ITZ, 5JCB e 5XLT. Os cálculos foram feitos tanto apagando as águas cristalográficas presentes no sítio de ligação avaliado, como usando elas. Depois, empregando dinâmica molecular, três trajetórias de 200 ns cada foram geradas para os dois complexos proteína-ligante obtidos das simulações de docking. Os resultados mostram um maior fitness score para o composto 1b, nos modelos com e sem águas no sítio de ligação. No modelo usando as águas os dois enantiômeros conseguiriam se ligar na orientação esperada para esse tipo de compostos. Já nas simulações de dinâmica molecular só o composto 1b consegue-se manter no sítio de ligação, de acordo com os cálculos do RMSD do ligante quando comparado com a sua posição inicial. Além disso, o composto 1b conseguiria manter a rede de águas do sítio de ligação o que explicaria sua estabilidade e atividade antipolimerização de tubulina. Os modelos mostram que efetivamente só um dos enantiômeros pode ser ativo e se manter estável no sítio de ligação avaliado.

Palavras-chave: Tubulina. Enantiómero.

Referências:

1 MCLPUGHLIN, E. C.; O'BOYLE, N. M. Colchicine-binding site inhibitors from chemistry to clinic: a review. **Pharmaceuticals** , v.13,n.4,p.1–43, 2020.

2 PARKER, A. L.; TEO, W. S.; MCCARROLL, J. A STINMETZ, M. O.; PROTA, A. E. Microtubule-targeting agents: strategies to Hijack thye cytoskeleton. **Trends Cell Biology** v..28 , n.10, p.776–792, 2018.

3 MAGALHAES, L. G.; MARQUES, F. B.; DA FONSECA, M. B.; ROGÉRIO, K. R.; GRAEBIN, C.S.; ANDRICOPULO, A. D. Discovery of a series of acridinones as mechanism-based tubulin assembly inhibitors with anticancer activity. **PloS One,** v.. 11, n. 8, p. e0160842, 2016.

357

PG180

Fitting das estruturas de bandas a partir de estratégias que envolvem propriedades de simetrias dos materiais baseadas na teoria de grupos

WANDERLEY, A. B.[1]; SILVA, J. L. F.[2]; SIPAHI, G.[1]

adilson.wanderley@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Química de São Carlos - USP

Novos dispositivos eletrônicos e fontes de luz laser, por exemplo, tem seu desenvolvimento relacionado ao conhecimento da estrutura de bandas eletrônicas dos materiais semicondutores. Modelos teóricos utilizados na descrição destas estruturas de bandas, como Hamiltonianos efetivos, fornecem uma descrição realística com baixo custo computacional, em comparação com cálculos de primeiros princípios.(1) Abordagens como o método **k·p** são usadas extensivamente por algumas décadas na construção desses Hamiltonianos e permitem ajustes de curvas sob dados experimentais para descrição dos *spin splitting* e fatores-g efetivos. (1-2) A construção desses Hamiltonianos matriciais depende de parâmetros que podem ser obtidos da simetria do grupo cristalino do material que se pretende estudar. Neste sentido, o Laboratório de Física Computacional do IFSC desenvolveu e utiliza, em parceria com o QTNano do IQSC, um método que extrai parâmetros preexistentes das estruturas de bandas, utilizando teoria de perturbação de Löwdin e termos de massa efetiva que vão além da ordem zero, e um *fitting* com estruturas de bandas de Hamiltonianos previamente calculados.(1-3) No entanto, em muitos casos é necessário incluir um número maior de bandas para descrever os parâmetros que compõem os elementos de matriz desses Hamiltonianos, como o caso de materiais com *gap* indireto (fundo da banda de condução não alinhado ao topo da banda de valência) ou quando os *spin splitting* são da ordem do *gap*. A abordagem utilizada para resolver estes problemas, que resultam em valores espúrios, consiste em, a partir das simetrias do sistema aplicar diferentes vínculos à busca de parâmetros, como por exemplo, o uso da simetria de inversão espacial do Hamiltoniano. Esta estratégia permitirá obter uma descrição mais realística, melhorando o *fitting* para determinar parâmetros como a massa efetiva e fatores-g. Todo esse procedimento está sendo realizado na construção de uma *framework* para auxiliar no processo de tomada de decisão sobre qual tamanho, e números de parâmetros, do Hamiltoniano são suficientes para uma descrição realística do sistema.

Palavras-chave: Estruturas de bandas. Hamiltonianos efetivos. Método k·p, Spin splitting. Fator-g efetivo. Massa efetiva. Perturbação de Löwdin

Referências:

1 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 Applied Physics**, v. 123, n. 065702, p. 065702-1-065702-13, 2018, DOI. 10.1063/1.5018325.

2 MARQUARDT, O. *et al.* Multiband k·p model and fitting scheme for ab initio based electronic structure parameters for wurtzite GaAs. **Physical Review B**, v. 101, p. 235147-1-235147-12, 2020, DOI. 10.1103/PhysRevB.101.235147.

3 BASTOS, C. M. O. *et al.* Stability and accuracy control of k·p parameters. **Semiconductor Science**

and Technology,v. 31, p. 105002-1-105002-10, 2016, DOI. 10.1088/0268-1242/31/10/105002.

359

PG181

Sistemas estáticos, estacionários e dependentes do tempo no Anti-de-Sitter e sua interpretação holográfica

RAMPONI, T. C.
teka_ramponi@hotmail.com

As modificações da Relatividade Geral são geralmente motivadas assumindo que a Relatividade Geral é apenas um limite clássico de baixa energia de uma teoria quântica da gravidade (mais geral) que deve ser aplicável bem na escala de Planck e próximo a ela. Um dos melhores candidatos para tal teoria continua sendo a teoria das Cordas. Uma previsão notável da Teoria das Cordas é a chamada dualidade calibre/gravidade, uma conjectura que relaciona as teorias da gravidade em (d + 1) dimensões espaço-temporais às teorias de calibre em d dimensões. O exemplo mais bem testado e bem estudado é a correspondência Anti-de Sitter / Teoria de Campo Conforme (AdS / CFT) (1), que conecta uma teoria da gravidade no espaço-tempo AdS em (d + 1) dimensões a uma teoria de calibre na fronteira de AdS. Esta dualidade é uma dualidade de acoplamentos fraco-forte tal que as teorias clássicas da gravidade em AdS podem ser usadas para descrever sistemas quânticos fortemente acoplados na fronteira do AdS. Essas ideias foram aplicadas principalmente à descrição de supercondutividade de alta temperatura na estrutura de supercondutores holográficos (2)também como a descrição do plasma quark-gluon. Estamos interessados em modelos de gravidade estendidos que contêm uma interação direta entre os graus de liberdade do tensor e outros campos, por exemplo os campos escalares ou vetoriais.Em alguns desses modelos, foi demonstrado que os buracos negros formam cabelos escalares ou vetoriais espontaneamente.(3)Ao estudar esses modelos no espaço-tempo AdS, eles permitem interpretações interessantes em termos da correspondência AdS/CFT. O objetivo deste projeto é compreender o caso da vetorização espontânea em AdS.

Palavras-chave: Relatividade geral. Teoria de campo conforme. AdS/CFT.

Referências:

1 MALDACENA, J.The large-N limit of superconformal field theories and supergravity. **International Journal Theoretical Physical,**, v.35,p.1113,1999. DOI:https://doi.org/10.1023/A:10266543129611113. 2 HARTINOLLI, S. A.;HERZOG,, C. P. ;HOROWITZ,G. T. Holographic s.uperconductors, **Journal of High Energy Physics,**v.2008,n.015, p.0812 ,2008.
3 BRIHAYE, Y. ; HARTMANN,B. Spontaneous scalarization of charged black holes at the approach to extremality, **Physics Letters B**, v. 792, n.10, p.244-250,2019.

360

PG182
Dinâmica de vórtice no toróide BEC

BERETA, S.[1]
salvio.bereta@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho visa o estudo da dinâmica de vórtice em toróide de condensado de Bose-Einstein de superfície planas. Há três maneiras de estudar o movimento dos vórtices no toróide: a primeira é através da solução da equação de Gross-Pitaevskii, a qual demanda bastante trabalho; a segunda é através do método carga imagem, mas no toróide a carga imagem gera outra carga imagem, o que acaba por induzir infinitas cargas imagens complicando o problema; e por último, a solução que simplica o problema, duas transformações conformes, as quais tranformam o toróide em um semi-plano. Essas soluções são trazidas no artigo Phys. Rev. A 66, 033602.(1) Achadas as soluções no toróide será possível mais adiante (em outro trabalho) adicionar o potencial harmônico, o qual existe experimentalmente. A dinâmica observada de único vórtice no toróide consiste na rotação em torno do eixo do toróide, a rotação pode variar de sentido dependendo da posição e também da carga do vórtice, quanto mais próximo maior a velocidade porque maior será o efeito da carga imagem. Caso haja dois vórtices próximos de mesmo sinal o movimento descrito será de rotação em torno do centro de massa dos vórtices e o centro de massa irá rotacionar pelo toróide. Caso os vórtice estejam separados de um ângulo de pi radianos e de cargas opostas cada um descreverá um movimento cíclico sem cruzar o meio do toróide.

Palavras-chave: BEC Toróide. Vórtice.

Referências:

1 SCHULTE, T.; SANTOS, L.; SAPERA, A.; LEWENSTEIN, M. Vortex-vortex interactions in toroidally trapped Bose-Einstein condensates; **Physical Review A**, v. 66,n.3,p. 033602 ,Sept. 2002

PG183

Análise multi-resolução inteligente: combinando a transformada wavelet com estratégias de deep learning para redução de ruídos em sinais e imagens de ressonância magnética

QUEIROZ, G. E. T.[1]; PAIVA, F. F.[1]; GUIDO, R. C.[2]

getqueiroz@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Departamento de Computação e Estatística - UNESP

Imagens por Ressonância Magnética (RM) têm sido utilizadas com sucesso em diversas aplicações ao longo das últimas décadas, desde o estudo de rochas até a compreensão do funcionamento cerebral. Essa técnica engloba inúmeras características que possibilitam o estudo não invasivo do objeto de interesse e mesmo que nas últimas décadas a tecnologia do scanner de RM tenha sofrido tremendas melhorias na resolução espacial, velocidade de aquisição e relação sinal-ruído, imagens por RM ainda são prejudicadas com degradações causadas por inomogeneidades de campo, ruído e outros artefatos.(1) Algo importante a se considerar, particularmente em aplicações in vivo, está na relação entre a qualidade final da imagem e o tempo de aquisição. O sinal de RM é intrinsecamente baixo e as maneiras de compensar isso invariavelmente resultam em maior tempo de aquisição. Como o ruído é inerente ao experimento, dado toda eletrônica necessária à realização do exame, além das características da amostra/voluntário em si, aquisições mais curtas invariavelmente resultam em imagens degradadas pelo ruído, dificultando a realização de análise apropriada e causando interferência no pós-processamento. O termo ruído aqui se refere estritamente ao ruído térmico (ruído de Johnson-Nyquist). A variância do ruído térmico pode ser descrita como a soma de variâncias de processos estocásticos independentes (2) relacionadas ao objeto da análise e ao equipamento. Tendo em vista estas características, é natural admitir que as componentes real e imaginária dos dados crus estejam então contaminadas por ruído gaussiano branco (3) complexo. Para a aquisição de dados de RM com bobina única, por exemplo, para um sinal $S(x)$ o seguinte modelo simplificado pode ser adotado $S(x) = A(x) + \eta(x; 0, \sigma^2)$, onde $\eta(x; 0, \sigma^2)$ é um ruído aditivo gaussiano branco complexo. Quando a magnitude $M(x)$ do sinal é calculada com o objetivo determinar a intensidade na imagem, este sinal por sua vez, agora no domínio da imagem, por apresentar dependência de $A(x)$, passa a ser melhor representado por uma distribuição de Rice. De uma perspectiva estatística, a reconstrução da imagem a partir dos dados crus de RM vai resultar na modificação da distribuição de probabilidade do sinal no domínio da imagem. Este aspecto consiste em um problema em aberto, uma vez que os algoritmos de reconstrução têm evoluído e não há uma forma de prever os possíveis efeitos no ruído colocando incerteza sobre a escolha de qual método de supressão deveria ser adotado. O presente trabalho tem como objetivo fundamental compreender e caracterizar o ruído presente em imagens por RM, considerando diferentes estratégias de aquisição e de reconstrução de imagens utilizadas em sistemas clínicos de Ressonância Magnética. Além disso, propomos desenvolver uma estratégia de remoção de ruído para essas imagens utilizando transformada wavelet associada a métodos de aprendizagem profunda (deep learning). A transformada wavelet é reconhecida no contexto de imagens por RM por efetivamente reduzir o ruído preservando detalhes e características da imagem. Já os métodos de aprendizagem de máquina, mais especificamente as redes neurais artificiais profundas, são capazes de aprender relacionamentos complexos através de exemplos e posteriormente se tornam

aptos a generalizar a informação aprendida.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Wavelets. Deep learning.

Referências:

1 SANTIAGO, A. F; GONZALO, V. S. F. **Analysis of Noise in MRI:** modeling, filtering and estimation. New York, NY: Springer, 2016.
2 LI, S. *et al*. MRI denoising using progressively distribution-based neural network. **Magnetic Resonance Imaging**, v. 71, p. 55–68, Sept. 2020.DOI:https://doi.org/10.1016/j.mri.2020.04.006.
3 HENKELMAN, R. M. Measurement of signal intensities in the presence of noise in MR images: technical reports: signal intensities in MR image noise. **Medical Physics**, v. 12, n. 2, p. 232–233, Mar. 1985.

363

PG184

Production of fermentable sugars and nanolignins via liquid hot water and sulfonated pretreatment combinations aiming at the optimal enzymatic conversion of sugarcane bagasse.

KANE, A. O.[1]; POLIKARPOV, I.[1]; ARNOLDI, V.[1]

aissatakane@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

- In the context of energy transition and the fight against climate change, the production of 2nd generation bioethanol is recognized as a promising way to reduce our dependence on fossil fuels. On the other hand, lignocellulosic biomass as sugar cane bagasse constitutes an enormous reservoir of reduced carbon that can serve as a feedstock to produce renewable fuels, chemicals, and polymeric materials.(1) Indeed lignocellulose biomass, considered as "waste," can potentially be converted into various value-added products, including biofuels, chemicals, cheap energy sources for fermentation. Generally, lignocellulosic biomass consists of 35–50% cellulose, 20–35% hemicellulose, and 10–25% lignin. Cellulose is a major structural component of plant cell walls, while hemicellulose macromolecules are often repeated polymers of pentoses and hexoses. In addition, lignin is the largest natural source of aromatic molecules and represents a promising renewable chemical raw material.(2) While cellulose is essential for the biomass-to-bioethanol conversion process, lignin is undesirable in this context. Therefore, pretreatment is necessary to break down the lignocellulose structure and separate lignin from carbohydrates (cellulose and hemicellulose). However, the isolation and purification of lignin on an industrial scale are still under development. Therefore, adequate pretreatment methods are necessary for increasing concentrations of fermentable sugars after enzymatic saccharification and extracting lignin efficiently.(3) The work aims at nano lignins and fermentable sugar production from respectively lignin and carbohydrates via enzymatic conversion after combined liquid hot water and sulfonated pretreatments sugar cane bagasse.

Palavras-chave: Sugar cane bagasse. Liquid hot pretreatment. Sulfonated pretreatment. Nanolignin. Enzymatic hydrolysis.

Referências:

1 SMIT, A.; HULLIGEN, W. Effective fractionation of lignocellulose in herbaceous biomass and hardwood using a mild acetone organosolv process. **Green Chemistry**. v.19, n.22,p.:5505–14,2017. 2 BERTELLA, S.; UTERBACHER, J.S. Lignin functionalization for the production of novel materials .**Trends in Chemistry**,v.2, p.440-453,2020.DOI: 10.1016/j.trechm.2020.03.001. 3 VIEIRA, S.*et al*. Sustainability of sugarcane lignocellulosic biomass pretreatment for the production of bioethanol. **Bioresource Technology**.v.;299,p:122635,2020.DOI; https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.122635.

PG185
Septins and flaviviral proteases: a structural analysis

ROSA, H. V. D.[1]; MENDONÇA, D. C.[1]; LEONARDO, D.[2]; BROGNARA, G.[2]; BRANDAO NETO, J.[3]; PEREIRA, H.[2]; ARAÚJO, A. P. U.[1]; GARRATT, R.[1]

higor.rosa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]USP

[3]Diamond Light Source

Recent studies revealed that the Zika virus (ZIKV) protease NS2B-NS3 may mediate and induce microcephaly.(1) This protease promotes the cleavage of host cytoskeletal proteins essential to neurogenesis, called septins. These proteins are central to cytokinesis: they form hexameric and octameric complexes that polymerize into filaments to perform their functions. Although cellular effects (after cleavage) have been determined, the immediate effect and importance of the cleaved region to the formation of septin structures are unknown. We have systematically characterized and evaluated the polymerization abilities of septin complexes containing truncated septin constructs (mimicking the protease effect) through integrative structural biology techniques (EM, MX, and other biophysical techniques). We observed a disturbance in the septin filament formation caused by the absence of the cleaved domain by EM.(2) Furthermore, the structural analysis of crystallographic septin heterocomplexes provided evidence for establishing the structural basis for the molecular recognition involved in the process of complex formation and filament assembly.(3) We hope that these results will help us understand more about several aspects of septins and the implications of their cleavage by ZIKV and its relationship with microcephaly.

Palavras-chave: Septins. Integrative structural biology. Flaviviral proteases.

Referências:

1 LI, H. *et al.* Zika virus protease cleavage of host protein septin-2 mediates mitotic defects in neural progenitors. **Neuron**, v. 101, n. 6, p. 1089- 1098., March 2019. DOI: https://doi.org/10.1016/j.neuron.2019.01.010.
2 LEONARDO, D. A. *et al.* Orientational ambiguity in septin coiled coils and its structural basis. **Journal of Molecular Biology**, v. 433, n. 9, p. 166889, April 2021. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmb.2021.166889. 3 ROSA, H. V. D. V. D. *et al.* Molecular recognition at septin interfaces: the switches hold the key. **Journal of Molecular Biology**, v. 432, n. 21, p. 5784–5801, October 2020. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmb.2020.09.001.

PG186
Efeitos de oscilações sequenciais em superfluidos atômicos

BARROS, L. W. T.[1]; BAGNATO, V. S.[1]
wtbleonardo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde que foi reproduzida em laboratório pela primeira vez, a condensação de Bose Einstein tem despertado os mais diversos interesses no âmbito da pesquisa em física atômica e em diversas outras áreas relacionadas. Estudos recentes que envolvem excitações de gases de Bósons por campos externos observam que, sendo essas excitações oscilações periódicas, são gerados vórtices no condensado (1)e, posteriormente, o sistema passa a apresentar um comportamento não-linear. A depender da frequência e da amplitude do campo externo, podemos perceber, para alguns tempos de excitação, uma proliferação dos vórtices que, posteriormente, gera vórtices enovelados no condensado.(2) Ocorre, então, uma granulação do superfluido. Neste trabalho nos preocupamos em estudar comportamentos não-lineares em condensados após estarem sujeitos a potenciais oscilantes. O método de investigação adotado em nosso trabalho consiste em realizar uma excitação, desligá-la por algum tempo e, novamente, aplicar mais um período de excitação. O processo se assemelha à aplicação de campos oscilatórios separados de Ramsey mas, agora, o fluido aprisionado é um sistema de muitos corpos. Variamos os seguintes parâmetros: o intervalo entre a primeira e a segunda excitação, e o tempo de duração desta. Variamos, também, os tipos de oscilações: inicialmente, utilizamos oscilações regulares e, por fim, introduzimos oscilações temporalmente aleatórias que, como é esperado, adicionam um elemento de desordem no sistema. Nosso objetivo é investigar como os processos são cumulativos e como ocorre o decaimento após as excitações em nosso sistema de muitos corpos.

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

Referências:

1 MATTHEWS, M. R. *et al.* Vortices in a Bose-Einstein condensate,**Physical Review Letters**, v. 83, n. 13, p. 2498, 1999. 2 RAMAN, C. *et al.* Vortex nucleation in a stirred Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 87, n. 21, p. 210402, 2001.

PG187

Edge-state related phenomena at topological-insulator/ferromagnet interfaces

ARAUJO, R. N.[1]; EGUES, J. C.[1]

ronaldonasaraujo@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Topological materials have received great attention in recent years because of their promising potential for applications and topological quantum computing.(1)We use a lattice tight-binding model combined with linear response to investigate the electronic and transport properties of topological insulator/ferromagnet hetero-interfaces.(2) Our preliminary results confirm (and are consistent with) the findings of (2) concerning the edge-state leaking, spin susceptibilities, persistent laminar currents etc. Unfortunately, with the pandemic our pace of work has been slowed down. Our next step is to extend our calculations to junctions between topological insulators, superconductors and ferromagnetic insulators.(3)

Palavras-chave: Topological insulator. Ferrogamagnetic materials. Edge states.

Referências:

1 KITAEVA, Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. **Physics Uspekhi**, v.44, .n.105, p.131,2001. 2 ALICEA, J. Majorana fermions in a tunable semiconductor device. **Physical Review B**,v.81,n.12,p.125318,2010. 3 ZEGARRA, A.; EGUES, J. C.;CHEN, W. Persistent currents and spin torque caused by percolated quantum spin hall state.**Physical Review B**,v.101, n.22, p.224438,2020.

367

PG188

Representação e caracterização de circuitos amplificadores através de grafos

MIRANDA, W. M.[1]; COSTA, L. F.[1]
willianmulia@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Grafos e redes complexas têm sido largamente aplicados nas mais variadas áreas científicas e tecnológicas.(1) No ramo da eletrônica, existe uma grande variedade de circuitos eletrônicos amplificadores, sendo muitos desses com funções similares ou complementares. Tomando-se como 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 desenvolver uma ferramenta computacional que auxilie na criação de grafos baseados em imagens de esquemas eletrônicos de circuitos amplificadores em geral, e que possua um formato de saída compatível para bibliotecas, visualizadores e interpretadores de grafos como, por exemplo, a biblioteca "iGraph". Como objetivo complementar, a pesquisa também busca representar vários circuitos amplificadores (no nível de componentes eletrônicos), por meio de grafos advindos da ferramenta computacional desenvolvida, que servirão de base para o estudo com medidas específicas, com finalidade de identificar, posteriormente, possíveis agrupamentos quais poderão auxiliar na identificação dos parâmetros específicos em cada rede ou circuito. Com isso, esperamos poder entender melhor a diversidade das medidas e dos circuitos eletrônicos utilizados, tais quais possuem vasta utilização atualmente.

Palavras-chave: Grafos .Redes complexas. Amplificador. Software.

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, May/June 2011.
2 CANCHO, R. F.; JANSSEN, C; SOLÉ R. V. Topology of technology graphs: small world patterns in electronic circuits. **Physical Review E**, v. 64, n. 4, p. 046119-1-046119-5, Sept. 2001.

368

PG189

Simulação de metasuperfícies fabricadas via transferência direta a laser

COUTO, F.[1]

filipe.couto@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Introdução Superfícies periodicamente estruturadas em escalas inferiores ao comprimento de onda, chamadas metasuperfícies, permitem grande versatilidade na manipulação da propagação da luz, com a vantagem de possuírem baixas perdas, especialmente quando fabricadas a partir de materiais dielétricos.(1) Tais características tornam estas estruturas peças importantes no desenvolvimento de dispositivos fotônicos miniaturizados. Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo simular as propriedades ópticas de uma metasuperfície formada por micro-estruturas de fibroína, estruturada através da técnica de LIFT (laser-Induced foward transfer) Métodos e Procedimentos Através da análise de imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e microscopia de força atômica (FEM), a geometria das micro-estruturas foi determinada como hemisférios de elipsoides, com altura de 1 μm e raio de 1.6±0.2 μm. A matriz periódica foi determinada como uma rede hexagonal assimétrica, onde um dos vetores de rede possui comprimento médio de 3.8 μm e o outro 5.2 μm, como pode ser observado na fig. 1-a. Para simular a o comportamento óptico da estrutura, foram executadas simulações no domínio da frequência utilizando o software de elementos finitos Comsol Multiphysics. O modelo computacional consiste em uma célula 3D hexagonal (fig 1-b), onde as paredes laterais possuem condições periódicas de contorno. Uma onda plana é excitada por uma porta periódica antes das estruturas e absorvida por outra porta periódica após incidir no conjunto estrutura mais substrato. As portas, além de excitarem e absorverem a radiação, também computam a reflectância e transmitância para as componentes normais do campo e possíveis ordems de difração.**ResultadosSimulações indicam que para regiões espectrais onde o comprimento de onda da radiação se compara ao tamanho das estruturas, a reflectância do conjunto estruturas mais substrato é inferior ao esperado em relação à um substrato não estruturado, independente do ângulo de incidência. Assim, a metasuperfície pode suprimir parte da reflexão de Fresnel esperada na interface ar-substrato. Resultados experimentais preliminares, obtidos por espectroscopia no infravermelho utilizando a técnica de reflectância total atenuada (ATR), sugerem boa aderência às simulações para a região do infravermelho próximo, como pode ser observado na fig. 1-c. ![Figura 1: a) Microscopia da estrutura. b) Ilustração do modelo computacional c): Comparações com o experimento][1]** Conclusões e perspectivas Os resultados obtidos através de simulações numéricas sugerem que a superfície estruturada pode suprimir parte da reflexão esperada para o substrato não estruturado. Experimentos preliminares aparentam aderir aos resultados previstos pelas simulações, porém ainda são necessárias medidas diretas da transmitância da estrutura para se obter resultados conclusivos. Próximas etapas do trabalho incluem simular as componentes dipolares para a seção de choque de espalhamento das micro-estruturas (1), com o intuito de compreender os mecanismos que levam à supressão da reflexão. [1]: https://ibb.co/5GcJ4nq

Palavras-chave: Metasuperfícies. Elementos finitos. Fotônica.

Referências:

1 CHEN, H.T.; TAYLOR, A.; NANFANG, Y. A review of metasurfaces: physics and applications, **Reports on Progress in Physics**, v. 79., n.7, p.076401,2016. DOI: 10.1088/0034-4885/79/7/076401.

370

PG190

Efeitos da acidificação dos oceanos sobre a toxicidade das nanoparticulas de óxido de Cério e Zinco (CeO2 - ZnO) na microalga marinha Navicula sp.

MONTERO, M. A.[1]; ZUCOLOTTO, V.

monterotuesta@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde os tempos pré-industriais, o oceano absorve continuamente mais de 40% do CO2 antropogênico, reduzindo o pH da água do mar e causando a acidificação dos oceanos (AO). O Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), prevê uma queda de 0,3 para 0,5 unidades no pH dos oceanos até o final do século, caso não haja uma redução significativa nas emissões de CO2 (1) Os efeitos da AO não atuam isoladamente, sendo intensificada pela ação simultânea de outros fatores como o afluxo de metais pesados, a eutrofização e o enriquecimento orgânico. Há 10 anos, a produção de nanomateriais tem aumentado, consideravelmente, devido as suas características físico-químicas e versatilidade de uso. A Organização para Cooperação e Desenvolvimento Econômico (OCDE), considera esses materiais como poluentes emergentes dos corpos d'água. Devido às suas propriedades intrínsecas, grande demanda e importância comercial, as nanopartículas (NPs) de óxidos metálicos, como o óxido de Cério e Zinco (Ce2O, ZnO), têm dispertado grande interesse e preocupação.(2) Essas NPs têm sido objeto de estudo em diversas áreas da ciência, no entanto, dados sobre seus possíveis efeitos tóxicos combinados com a AO sobre as microalgas marinhas, ainda são escassos. Quando NPs estão presentes em sistemas aquáticos continentais, estuarinos ou marinhos, as combinações com outros poluentes e as variações no pH, podem influenciar seu comportamento e, por consequência, sua toxicidade. O objetivo deste estudo é verificar o efeito da AO sobre a toxicidade das NPs de Ce2O e ZnO na microalga marinha Navicula sp. Um dos principais produtores primários da cadeia alimentar dos ecossistemas marinhos. Para avaliar a toxicidade da combinação entre a AO e as NPs na microalga Navicula sp., será usada a metodologia proposta por Xia Bin, 2018 (3) para a obtenção de dados sobre: I) O tamanho, as características de superfície, a estabilidade em solução aquosa e também a morfologia das nanopartículas de Ce2O e ZnO em meio acidificado (pH 7,6) e meio não acidificado (pH 8,2). II) O impacto das nanopartículas de Ce2O e ZnO na inibição do crescimento, e atividade fotossintética da Navicula sp. em meio de cultura acidificado e não acidificado III) Reserva de energia e indicadores de estresse oxidativo refletida no conteúdo de carboidratos, lipídios e proteínas totais, a geração de espécies reativas de oxigênio, além da atividade bioquímica como peroxidação de membrana, viabilidade celular e atividade enzimática de Navicula sp exposto às nanopartículas de Ce2O e ZnO em condições de meio de cultura acidificada e não acidificada e IV) a internalização das nanopartículas Ce2O e ZnO na microalga Navicula sp. Os resultados possibilitarão uma melhor compreensão do risco ambiental marinho causado por NPs, sob futuras condições de acidificação oceânica.

Palavras-chave: Acidificaçâo dos oceanos. Nanoparticulas. Estresse oxidativo.

Referências:

1 INTERGOVERNAMENTAL PAINEL ON CLIMATE CHANGE.PCC **Climate change 2014:** impacts, adaptation, and vulnerability..Cambridege: Cambridge University Press, 2014.

2 PALMBERG, C.;DERMIS,H.;MIGUET, C. **Nanotechnology:** an overview based on indicators and statistics. Paris:OECD/OECDE,2009.
.3 XIA, B. *et, al.* Ocean acidification increases the toxic effects of TiO2 nanoparticles on the marine microalga Chlorella vulgaris. **Journal Hazard Materials,** v.346,p.1–9, 2018.DOI:10.1016/j.jhazmat.2017.12.017.

372

PG191

Bloch oscillations of ultra-cold strontium atoms continuously monitored with a ring cavity

RIVERO, D.[1]
dalilarr@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

This research project aims to construct an atomic interferometer to be used as a gravimeter. We are looking to implement Bloch Oscillations of ultra-cold matter in a ring cavity and monitor this frequency in a non-destructive way using a system based on Collective Atomic Recoil to continuously measure the gravitational force.(1)Strontium atoms will be cooled to ultracold temperatures, near the photonic recoil limit. At this temperatures the cold cloud of atoms presents a matter-wave behavior that can be helpful to realize interferometry experiments.(2)For that the atoms will be placed inside the ring cavity modes in the presence of a periodical optical lattice. As the periodic potential is on the same direction of the gravitational force, the atoms will perform Bloch oscillations with a frequency proportional to g. This periodicity in the matter wave dynamics can be measured continuously with the light that escapes the cavity.(3)In this work, some reliminary characterizations will be presented for the production of the ultra-old cloud that will serve as playground for this experiment.

Palavras-chave: Cold atoms. Strontium. Gravimeter. Ring cavity. Photonic recoil. Red-MOT.

Referências:

1 SAMOYLOVA, M.;PIOVELLA, N. ;ROBB, G. R. M.;BACHELARD, R.; COURTELLE, P.. W. Synchronization of Bloch oscillations by a ring cavity, **Optical Express**, v. 23, n.11,p.14823-14835,2015.
2 STELIMER,S.;SCHRECK, F.;KILLIAN, T.C. Degenerate quantum gases of strontium.*In*:MADISON, K. W.; WANGg,Y.; REY, A. M.**Annual review of colds atoms and molecules**. Singapore: World Scientific,2014.chap.1,p.1-80.
3 SAMOYLOVA, M.;PIOVELLA, N.; HUNTER, D.;,ROBB, G R M ; BACHELARD, R.; COURTEILLE, P. W. Mode-locked Bloch oscillations in a ring cavity , **Laser Physics Letters**, v. 11,n.12, p. 126005,2014.

373

PG192

Spontaneous scalarization of self-gravitating magnetic fields.

CAPOBIANCO, R. A.[1]; HARTMANN, B.[1]; BRIHAYE, Y.[2]

rogerio.capobianco@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Université de Mons.

The spontaneous scalarization process appears in modified theories of gravity by non-minimally coupling a scalar field with high order curvature terms. In this research we study the spontaneous scalarization of an extended, self-gravitating system which is static, cylindrically symmetric and possesses electromagnetic fields. We find that a real massive scalar field condenses on this Melvin magnetic universe solution when the scalar field is coupled between both the magnetic field and the space-time curvature. Furthermore, the solution exists in a finite interval of the constant coupling and that solution with a number of nodes k in the scalar field exists.(1)

Palavras-chave: Spontaneous scalarization. Gravity. Modified theory of gravity.

Referências:

1 BRIHAYE, Y.; CAPOBIANCO, R.; HARTMANN, B. Spontaneous scalarization of self-gravitating magnetic fields. **Physical Review D,** v.103, n.12, p124020, 2021.

374

PG193

Modelagem por homologia de dois diferentes dímeros de septinas de levedura

SILVA, R. M.[1]; GARRATT, R.[1]

rafael_msilva@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas GTPases capazes de formar estruturas filamentosas não polares e que estão relacionadas a diversos processos celulares, como divisão celular, ancoragem de proteínas parceiras e formação de barreiras de difusão entre compartimentos intracelulares. Descritas pela primeira vez em células de levedura por Hartwell (1), elas também são conhecidas por serem o mais novo elemento do citoesqueleto. Apesar de terem sido identificadas primeiramente em leveduras, hoje se sabe que as septinas podem ser encontradas em uma miríade de seres vivos muito diferentes, como algas, protozoários, vermes e mamíferos, com notável exceção as plantas. Nos seres humanos, defeitos ligados a essas proteínas parecem estar relacionados a doenças como câncer, infertilidade masculina, Alzheimer e Parkinson.(2) Em leveduras, quatro diferentes septinas se polimerizam em heterooctâmeros compostos por quatro subunidades diferentes que se repetem na ordem Cdc11-Cdc12-Cdc3-Cdc10-Cdc10-Cdc3-Cdc12-Cdc11.(3) Essas subunidades são intercaladas por duas interfaces que se repetem, conhecidas como interface G (onde se liga um nucleotídeo de guanina) e interface NC (correspondente aos domínios N e C-terminal da proteína), servindo o octâmero como protofilamento básico na polimerização de filamentos de maior ordem por meio de interações entre duas septinas Cdc11 presentes nas extremidades das estruturas octaméricas. O presente trabalho tem como objetivo a modelagem por meio de homologia de dois dímeros presentes nos filamentos de leveduras: o dímero Cdc11-Cdc11 (uma interface NC) e o dímero Cdc11-Cdc12 (uma interface G). A compreensão molecular de como as septinas interagem em um organismo basal por meio da interpretação dos resíduos encontrados em ambas as interfaces pode elucidar os mecanismos por trás de sua polimerização em outros organismos, fornecendo uma nova abordagem para entender a condição humana.

Palavras-chave: Septinas. Modeller. Cdc11. Cdc12

Referências:

1 HARTWELL, L. H. Genetic control of the cell division cycle in yeast. IV. Genes controlling bud emergence and cytokinesis. **Experimental Cell Research**. v.69, n.2,p.265–276. 1971.

2 MOSTOWY, S., ;COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v.13, n.3, p.183–194. 2012.

3 BERTIN, A. *et al.* Saccharomyces cerevisiae septins: supramolecular organization of heterooligomers and the mechanism of filament assembly. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v.105, n.24, p.8274–8279, 2008.

375

PG194

Caracterização de jamming avoidance response em gymotiformes e modelo de deflexão de seu campo elétrico em coespecíficos

CESARINO, V.[1]; PINTO, R. D.[1]

vinicius.cesarino@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A descarga do órgão elétrico (DOA) do Gymnotus carapo (peixe pulsador) assume duas importantes funções no repertório comportamental do espécime: eletrolocalização e eletrocomunicação entre coespecíficos. Esta última é representada por uma variedade de alterações no intervalo entre os pulsos elétricos do peixe (IPI).(1) Apesar do comportamento elétrico chamado de Jamming Avoidance Response (JAR) ser característico e bem documentado em espécies de peixes onduladores, um comportamento correspondente no gymnotiforme foi encontrado em resultados preliminares, sendo observados em peixes com IPIs similares.(2) Nossas observações sugerem uma correlação entre a quantidade de JAR observada com a distância entre dois peixes fixados paralelamente. Tal estudo foi dirigido posicionando dois peixes em diferentes orientações e distâncias. Utilizando desta relação entre JAR e a distância entre dois peixes fixados foi possível inferir a distância necessária para que um peixe mude seu comportamento elétrico na presença de um coespecífico, bem como mapear o seu campo elétrico e criar um modelo de deflexão deste no corpo do outro peixe. Para tanto, três amplificadores de Instrumentação de entrada do tipo FET de alta velocidade (INA111) foram feitos sob medida para criar uma sonda tridimensional de tamanho reduzido capaz de captar e amplificar o sinal elétrico do peixe desprezando ruído de modo comum.

Palavras-chave: Jamming avoidance response. Gymnotus. Electrocommunication. Pulse type electric fish.

Referências:

1 CAPUTI, A.; BUDELLI, R. The electric image in weakly electric fish: I. a data-based model of waveform generation in Gymnotus carapo. **Journal of Computational Neuroscience**. v.2, p.131-147.1995.DOI: 131-47.10.1007/BF00961884.

2 GUARIENTO, R. T. *et al.* Automated pulse discrimination of two freely-swimming weakly electric fish and analysis of their electrical behavior during dominance contest. **Journal of Physiology**v.110,p.216–223,2016. DOI:10.1016/j.jphysparis.2017.02.001.

PG195

Investigação estrutural e bioquímica das enzimas da via de biossíntese da vitamina B6 em Staphylococcus aureus

BARRA, A. L. C.[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]

angelica.barra@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

As doenças infecciosas são de grande preocupação em todo o mundo e em meio a uma pandemia elas se tornaram ainda mais preocupantes, principalmente as infecções por microrganismos multirresistentes. Muitos pacientes de COVID-19 internados em UTIs adquirem infecções hospitalares e muitas delas são causadas por microrganismos resistentes, como o caso de Staphylococcus aureus resistente à meticilina (MRSA), o que torna o tratamento muito mais difícil e algumas vezes ineficiente.(1) Deste modo, é essencial que existam alternativas de fármacos para o tratamento de cepas resistentes e para isso é necessário identificar novos alvos moleculares para o desenvolvimento desses novos antibióticos. Os alvos ideais são proteínas e vias metabólicas conservadas em microrganismos, mas pouco semelhantes ou mesmo ausentes em humanos.(2) A via biossintética de vitamina B6 (piridoxal fosfato) é um exemplo, pois é essencial para a maioria dos patógenos, porém é inexistente em humanos. Essa via é composta de duas enzimas (Pdx1 e Pdx2) que formam um complexo multimérico. A enzima Pdx2 é uma glutaminase, a amônia resultante de sua atividade é transferida para Pdx1 que juntamente com a ribose 5-fosfato e o gliceraldeído 3-fosfato sintetiza o piridoxal fosfato.(3) A formação do complexo é transiente e deste modo dificulta a sua caracterização estrutural. Até o momento apenas o complexo mutante (Pdx2 inativa) foi caracterizado estruturalmente, apresentando 12 monômeros de cada enzima. No entanto, ainda não se sabe qual a forma ativa do complexo, pois em Saccharomyces cerevisiae foi observada a forma hexamérica em solução e sua atividade foi aproximadamente 4 vezes maior que a homóloga dodecamérica de Bacillus subtilis. Em vista disso, o objetivo desse projeto é investigar estrutural e bioquimicamente o complexo de S. aureus a fim de elucidar as questões remanescentes dessa via para que esta possa ser utilizada como alvo para descoberta de novos candidatos a antibióticos. Até o momento foi feita a caracterização estrutural e bioquímica de SaPdx1 cujos resultados foram apresentados no ano passado. Com relação ao estado oligomérico, foi observado por DLS e SAXS (Beamline P12, PETRA III - DESY, Hamburg) que este varia na presença de íons SO_4^{2-} e PO_4^{2-} a concentrações de 0,2M. Em condições em que não há a presença desses íons a proteína se apresenta hexamérica em solução, mas na presença de um desses íons há um deslocamento para a forma dodecamérica. Ensaios enzimáticos estão sendo realizados para determinar se a atividade da proteína é alterada dependendo do estado oligomérico. Além disso, estudos quanto ao complexo enzimático estão em andamento, até o momento foi observado um aumento em 3 vezes na atividade de Pdx1 na presença de Pdx2, correspondente à homóloga de Mycobacterium tuberculosis. Triagens de cristalização utilizando kits comerciais e análises quanto ao mecanismo de formação do complexo por DLS resolvido no tempo estão em andamento.

Palavras-chave: Vitamina B6 . Resistência microbiana. Biologia estrutural.

Referências:

1 CUSUMANO, J. *et al.* Staphylococcus aureus bacteremia in patients infected with COVID-19: a case series. **Open Forum Infectious Diseases**., v.7, n.11, p.1-7,2020.

2 BEGUM, A. *et al.* Staphylococcus aureus thiaminase II: Oligomerization warrants proteolytic protection

against serine proteases. **Acta Crystallografica D** v. 69, n.12, p.2320, 2013.
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. e1815,2008.

378

PG196

The Tb→Eu energy transfer process in tungsten-phosphate glasses

FARIA, W.[1]; CAMARGO, A. S. S.[1]

walter.faria@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Trivalent Terbium (Tb^{3+}) and Europium (Eu^{3+}) ions are commonly used as dopants in a variety of materials aiming at aplications such as white light generation (1) (Tb^{3+} and Eu^{3+} offering the green and red components, respectively), color-tunable emission and also luminescent thermometry at cryogenic temperatures (2), with the last example being of special interest here. Usually, Tb^{3+} ions are directly excited, followed by energy transfer to neighbouring Eu^{3+} ions and, finally, emission bands from both ions are detected. Therefore, the Tb^{3+}→Eu^{3+} energy transfer process is of great importance for all the aforementioned applications. Here, the optical properties of tungsten-phosphate glasses ($NaPO_3$ – WO_3), doped with both Tb^{3+} and Eu^{3+}, are studied, with focus on the dynamics of the energy transfer. The tungsten trioxide concentration is varied (5 to 40 mol%) and its effects on the emisison intensities and emission decays are analyzed, relating the increase in Eu^{3+} emission to structural changes caused by the introduction of WO_3. Different emission decay models (3) are employed in order to understand the routes and the rates of the Tb^{3+}→Eu^{3+} process. Also, the acceptor ion (Eu^{3+}) concentration is changed, causing not only the increase of the transfer rate but also giving an insight about energy migration between Tb^{3+} ions. Finally, an ideal concentration of dopant ions and WO_3 is proposed for luminescent thermometry.

Palavras-chave: Energy transfer. Glass. Lanthanidesl

Referências:

1 LI, B. *et al.* Energy transfer and tunable photoluminescence of LaBWO6:Tb3+,Eu3+ phosphors for near-UV white LEDs. **Dyes and Pigments** v. 150, p. 67-72, 2018. DOI: 10.1016/j.dyepig.2017.11.003. 2 BAO, G. *et al.* A stoichiometric terbium-europium dyad molecular thermometer: energy transfer properties **Light: science applications** v.7, n.96, p.1-10,2018. DOI: 10.1038/s41377-018-0097-7. 3 CARRASCO, I.; PICCINELLI, F.; BETTINELLI, M. Luminescence of Tb-based materials doped with Eu3+: case studies for energy transfer processes **Journal of Luminescence** v. 189, p. 71-77, 2017. DOI: 10.1016/j.jlumin.2016.06.065.

379

PG197

Automação de um frontend de RMN para controle de periféricos de baixa velocidade

MONTES, R. S.[1]

rafael.silva.montes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

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. Apesar de existirem no mercado ofertas de espectrômetros, eles possuem software e hardware proprietários, o que torna a característica de adaptabilidade, em termos de software e hardware, difícil e lenta, pois há dependência direta com o fabricante. (1) Assim, o desenvolvimento de um espectrômetro com ampla aplicabilidade, como o desenvolvido pelo grupo CIERMag, tem ampla relevância. Tal espectrômetro necessita de circuitos para intermediar as transmissões e recepções dos sinais captados e gerados. Ao conjunto destes, reconhecemos como o FrontEnd desse espectrômetro. A este deve ser associado um controle que o prepare para os experimentos que forem almejados no sistema ao qual forem inseridos. Este trabalho propõe a automação deste FrontEnd por meio de uma biblioteca desenvolvida em Python 3, sendo que esta prevê a utilização de uma rede de Raspberry Pi como o meio para realizar este controle. Esta biblioteca contém classes e métodos específicos para as partes do FrontEnd e para a comunicação entre Raspberry Pi e terminais clientes que irão operar o FrontEnd. A dinâmica entre as Raspberry Pi e o FrontEnd ocorre por meio do protocolo SPI e foram desenvolvidos soquetes TCP/IP para a manipulação da rede de Raspberry Pi.

Palavras-chave: FrontEnd. Espectrômetro. CIERMag.

Referências:

1 SOUZA, P. V. B. D. de. **Desenvolvimento de um subsistema non-real-time para o gerenciamento de dispositivos periféricos e desenvolvimento de interfaces gráficas**. 2016.120p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

PG198

Structural origins of Weathering stability in Sodium Aluminum Phosphosilicate glasses: results from multinuclear solidstate NMR

ECKERT, H.[1]; SANTOS, M. L.[1]; YAMAZAKI, H.[1]; NAKANE, S.; IKEDA, H.

eckert@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Quaternary sodium aluminophosphosilicate presents many important applications as the use of glassy optical fibers,(1) aldeary vastly used in energetic industry and as infrastructure basis. The characterization of amorphous materials using Nuclear Magnetic Resonance (NMR) enables the construction of a solid and explanatory structure model for the glasses, promoting a microscopic elucidation of their macroscopical effects. Structural studies show an improvement of mechanical and thermal proprieties when hexacoordinate silica or aluminum in higher a coordination species are found in the network.(2-3) Also, higher hydrolytic stability possibly relates with less P-O-P linkages.(1) To extend the knowledge about these glasses, we propose to comprehensively study of the structural origin of these properties use multinuclear single- and double resonance. The silicon is four-coordinated and successfully competes with phosphate, substituting the P-O-P linkages by P-O-Si. The hexacoordinated species are suppressed by the strong interaction between phosphorus and aluminum, which coordination number varies between 5.88 e 5.64. The double resonance experiments 31P(23Na) e 31P(27Al) validate the deconvolution of metaphosphate in two distributions, which points that phosphorus resonating in higher frequencies are stronger balanced by sodium and lower frequency stronger balanced by aluminum. Further experiments are being conducted in our laboratory in order to correlate the Raman spectra with the NMR. The changes in the physical chemical proprieties are suggested to be due the difference in the structure caused by the network formers playing different roles in connections expressed by Si-O-P, P-O-P, P-O-Al and P-O-P.

Palavras-chave: Aluminophosphosilicate. Spectroscopy. Nuclear magnetic resonance. Solid state. Weathering stability.

Referências:

1 IKEDA, H. Structure and weathering of SiO2 contained phosphate glass. *In*: INTERNATIONAL CONGRESS ON GLASS, 25., 2019, Boston. **Resumos** [...] Boston: American Ceramic Society, 2019. p. 143. Disponível em: https://ceramics.org/wp-content/uploads/2018/09/ICG19$_Abstracts_0520.pdf.Acessoem: 22jun.2021.$

2 KREIDI, N. J.; WEYL, W.A. Phosphates in ceramic ware: IV, phosphate glasses. **Journal of American Ceramics Society**, v.24, n. 11, p. 372-378, Nov. 1941.

3 ZHANG, L.; ECKERT, H. Short- and medium-range order in sodium aluminophosphate glasses: new insights from high-resolution dipolar solid-state NMR spectroscopy. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 110, n.18, p. 8907-9362, May 2006.

PG199

Study of mixed ions effect in Li-Cs-Sr metaphosphate glasses by solid state NMR and impedance spectroscopy

MORGUETO, G. F.[1]; SCHNEIDER, J. F.[1]; RODRIGUES, A. C.[2]

gabriel.morguetto@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

With the addition of a mobile ion species, ionic conductivity is introduced in a glass matrix, which makes these materials interesting for applications in batteries and sensors. However, when a second mobile ion species is added to the system, strong anomalies in the conductivity might be observed, reducing the values by orders of magnitude below the expected additive behavior. (1)This phenomenon is known as the mixed ion effect (MIE). The extent of the deviation is usually correlated with the size mismatch between the mixed ions, attaining several orders of magnitude for pairs such as Li-Na or Li-Rb. Other properties of the material dependent on ion diffusion also exhibit nonlinear behavior. A model that tries to explain the MIE is the Random Ion Distribution Model (RIDM) (2) whose hypothesis is the random mixture of mobile species and the presence of structurally different sites of occupation for each ion. To study the validity of the model, a vitreous system with intense MIE (Li-Cs metaphosphate) was disturbed by the addition of a third non-mobile specie (Sr), looking for conditions to inhibit MIE associated with the mixture of alkaline ions, according to the composition $(50 - x - y)\ Cs_2O - x\ Li_2O - y\ SrO\ \check{}50P_2O_5$, varying x from 0 to $37.5mol\%$ and y from 0 to $40\ mol\%$. Solid-state NMR, DSC and impedance spectroscopy (IE) techniques were used. With solid-state NMR, we observed linearity in the spectral line FWHM of the nucleus of ^{7}Li and ^{133}Cs as a function of their ionic density. For all Li-Cs ratios, we measured linear behaviors, indicating that variations of any of the ions do not affect the dilution of the others, indicative of the random mixture of ions, in accordance with the RIDM. In addition, through IE, we show that MIE is still present after the addition of Sr, which acts as blocking ion in the diffusion of Li and Cs, decreasing the conductivity globally.

Palavras-chave: Mixed Ions effect. Phosphate glass. Nuclear magnetic ressonance. Impedance sprectrocopy.

Referências:

1 ISARD, J. O. The mixed alkali effect in glass. **Journal of Non-Crystalline Solids,** v. 1, n. 3, p. 235-261,1969.

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.

PG200

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

FONTOLAN, L. S. B.[1]; THIEMANN, O.[1]

laure@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Automation allied to a miniaturized and high throughput format for protein production allows researchers to conduct high complexity experiments for screening expression conditions as it handles a number of different samples simultaneously. 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.

Palavras-chave: Protein expression. Recombinant protein. 3D printing. Free software. RepRap

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.

383

PG201
Perdas de três corpos em misturas atômicas de Na-K

OLIVEIRA, G. A.[1]; GUTTIERREZ, E. D. M.[1]; FARIAS, K. M.[1]; CASTILHO, P. C. M.[1]; SALCEDO, E. G. I.[1]

g.a.oliveira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A interação em gases atômicos ultrafrios acontece por meio de colisões entre os átomos. (1) Usualmente elásticas, as colisões de dois corpos são responsáveis pela termalização destes sistemas, enquanto que as colisões inelásticas de três corpos acarretam em perdas saturando o numero de átomos da nuvem atômica. No caso de misturas atômicas, além das colisões de três corpos intraespécies (entre átomos de mesma espécie), colisões de três corpos interespécies (entre átomos de espécies distintas) podem ser um fator limitante ao resfriar essas nuvens na proximidade da transição de fase para um condensado de Bose-Einstein de duas espécies atômicas. Dessa forma é necessário caracterizar estas perdas com o objetivo de minimizá-las. (2) Neste estudo, apresentamos a caracterização das perdas interespécies em um gás ultrafrio de 23Na e 39K quando aprisionados em uma armadilha magnética de Quadrupolo com um feixe de laser de potencial repulsivo no centro (Plug trap). Acompanhando o número de átomos de cada espécie como função da temperatura para diferentes número de átomos inicial da nuvem de potássio, foi possível obter o coeficiente de perdas de três corpos interespécies no caso das perdas do tipo Na+Na+K, dominante em nosso sistema.

Palavras-chave: Átomos. Colisões. Perdas. Misturas atômicas. Física experimental. Física atômica e molecular.

Referências:

1 KETTERLE, W.; DRUTEN, N. V. Evaporative cooling of trapped atoms. **Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics**, v. 37, p. 181–236, 1996. DOI: 10.1016/S1049-250X(08)60101-9.
2 CHIN, C. *et al.* Feshbach resonances in ultracold gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 82, n. 2, p. 1225, 2010.

PG202

tabular2vec: mapeando dados tabulares através do problema de graph-cut

RESENDE, B. M. F.[1]; COSTA, L. F.[1]

messias.physics@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Na era do big data a facilidade de construir bases de dados tabulares foi facilitada. Isto tanto devido a mecanismos de coleta autônomos, como o google analytics e aqueles obtidos através de pesquisas de opinião e censo. Portanto, criar um método que possa inferir relações entre as variáveis (perguntas) de tais bases de dados tabulares é essencial.(1)Tome como exemplo avaliações ocioeconômicas de estudantes de escola pública. De certa maneira, é contra intuitivo pensar que questões de saúde bucal sejam relevantes para análise de violência escolar e pobreza.(2-3) Enquanto o trabalho manual de pesquisadores com a utilização de análise qualitativa possa ajudar a agrupar e compreender as relações entre variáveis de bases de dados tabula 1. List itemres é interessante propor e desenvolver alternativas que possam extrair interpretação de tais datasets de forma automática permitindo a escalabilidade da análise. No presente trabalhos desenvolvemos e mostramos um método para mapear dados tabulares em um espaço vetorial tal que seja possível inferir relações entre as variáveis. Aplicando nosso método na base de dados do censo escolar conhecida como PeNSE fomos capaz de identificar relações entre tipos de atividade física, trajeto escolar e questões socioeconômicas o que é validado pela análise qualitativa de outros trabalhos. Acreditamos que nosso método possa auxiliar na busca de questionários mais compactos e aprimorar a sua análise.

Palavras-chave: Grafos . Machine learning . Censo

Referências:

1 GHOSH, A. *et al.* A comprehensive review of tools for exploratory analysis of tabular industrial datasets, **Visual Informatics**, v. 2, n. 4, p. 235–253, 2018. DOI: 10.1016/j.visinf.2018.12.004.
2 LEVY, R. B. *et al.* Consumo e comportamento alimentar entre adolescentes brasileiros: Pesquisa Nacional de Saúde do Escolar (PeNSE), **Ciência Saúde Coletiva**, v.15, supl.2, p. 3085–3097,2009. DOI: 10.1590/S1413-81232010000800013..
3 AMBRIOLA OKU, A. Y. *et al.*'Potential confounders in the analysis of brazilian adolescent's health: a combination of machine learning and graph theory, **International Journal of Environmental Research and Public Health**, v.17, n.1, p. 90, 2019. DOI: 10.3390/ijerph17010090.

PG203

Fase geométrica, Efeito Aharonov-Bohm, e as bases da Mecânica Quântica

ISRAEL, I.[1]; MAIA, L. P.[1]

iago.israel@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a publicação do trabalho seminal de Sir Michael Berry em 1984 (1), as fases geométricas tornaram-se grandezas bem populares em física teórica. Enquanto a maioria dos não especialistas depara-se com esse tema apenas ao estudar em livros-texto a evolução cíclica e adiabática de um Hamiltoniano dependente do tempo, na verdade a fase de Berry é relevante para a compreensão de temas tão diversos quanto os efeitos Hall quânticos, teorias topológicas de bandas e para a proposta de computação quântica holonômica.Esses desenvolvimentos posteriores a (1), tanto em aplicações quanto em princípios teóricos, deixaram claro que fases geométricas poderiam ocorrer em evoluções adiabáticas não cíclicas, em evoluções não adiabáticas ou mesmo apresentar caráter não Abeliano, por exemplo. Além disso,percebeu-se a posteriori que diversas manifestações de fases geométricas já aviam sido descobertas anteriormente a (1), como no efeito Aharonov-Bohm e em optica de polarização, e que elas também em problemas puramente geométricos ou de física clássica.Entretanto, a complexidade das ferramentas matemáticas necessárias para uma compreensão profunda das fases geométricas faz com que muitos pesquisadores focados nas aplicações incorporem essas grandezas em seus cálculos via procedimentos ad hoc, sem realmente entenderem as diferenças entre os diferentes casos. De fato, pouco após a introdução do conceito por M. Berry, Barry Simon percebeu (2) que, genericamente, uma fase geométrica pode ser interpretada como uma holonomia de um fibrado em uma variedade e que o potencial de calibre pertinente pode ser visto como uma conexão nesse fibrado.O objetivo deste trabalho é o estudo das técnicas de geometria diferencial (transporte paralelo, conexões, fibrados) que permitam a caracterização das diferentes holonomias de sistemas físicos de forma sistemática. A abordagem consiste na busca por uma sólida compreensão dos conceitos matemáticos relevantes, mas guiada por associações diretas com fenômenos físicos.(3)

Palavras-chave: Aharonovov-Bohm. Mecânica bohmiana. Classicidade. Fase geométrica.

Referências:

1 BERRY, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. **Proceedings of the Royal Society of London A**: mathematical, physical and engineering sciences v.392, n.1802,p.45-57,1984.
2 SIMON, B. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and Berry's phase. **Physical Review Letters**, v. 51, n. 24, p. 2167, 1983.
3 GARRITY,T. A. **Electricity and magnetism for mathematicians**: a guided path from Maxwell's equations to Yang-Mills. New York: Cambridge University Press, 2015.

PG204

Predição de interações miRNA-mRNA com Predictive Bi-Clustering Trees

ILIDIO, P.[1]; CERRI, R.[2]; THIEMANN, O.[1]; SANTOS, R. A. C.[1]; FRAJACOMO, H. C.[2]

ilidio@alumni.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

O projeto consiste em implementar e aperfeiçoar o algoritmo Predictive Bi-Clustering Trees (PBCT), proposto por Pliakos *et al.* em 2015 (1), e aplicá-lo à predição da existência de interação entre microRNAs (miRNAs) e RNAs mensageiros (MTI, *mirna-target interaction*), a partir de características extraídas computacionalmente das sequências biológicas.Os miRNAs são pequenas sequências (22 bp) de RNAs não codificantes capazes de desencadear a degradação dirigida de mRNAs, por meio do recrutamento de proteínas Argonautas e subsequente formação de complexos proteicos de silenciamento.(2) Trata-se de um importante mecanismo de regulação pós-transcricional da expressão gênica, com presença quase unânime nos processos biológicos que observamos. Nos humanos, estima-se computacionalmente que ais da metade dos genes codificadores de proteínas são alvos da regulação por iRNAs (2) e diversos fenótipos patológicos já foram associados a um funcionamento rregular desses processos, incluindo múltiplos tipos de câncer (2), de forma a ugerir o uso de miRNAs como biomarcadores e possíveis alvos terapêuticos.Atualmente, o principal parâmetro para identificação de alvos de miRNAs é o pareamento de suas bases 2 a 9, que configuram a região conhecida como *seed*, com o mRNA. Contudo, nota-se que não se trata de um padrão absoluto (3), não sendo necessária a completude do pareamento em muitos casos e observando-se participação de regiões mais próximas à ponta 3' em outros, especialmente para sítios-alvo em CDS, dado que a maioria das interações se faz presente na UTR 3' dos transcritos codificantes.(3) Softwares como o TargetScan levam em conta principalmente esses fatores de alinhamento, combinados a outras características genéricas das sequências, como o conteúdo GC, para prever pares miRNA-mRNA interagentes. O presente projeto objetiva a introdução de outras características mais complexas dessas sequências no processo preditivo, observando se a interação ainda se faz clara mesmo na ausência de alinhamentos, o que poderia trazer novos *insights* sobre o funcionamento das MTIs.Para este trabalho, os pares conhecidos de interação serão providos pela base de dados MiRTarBase, enquanto sequências dos microRNAs podem ser obtidas da miRBase. Como algoritmo preditivo, faz-se uso das PBCTs. Elas consistem em árvores de decisão regressivas que operam sobre uma matriz de interações, na qual cada miRNA é representado por uma coluna e cada transcrito alvo, por uma linha.(1) A presença ou ausência de interação são representadas na matriz por bits 1 e 0, respectivamente, nas posições da matriz correspondentes a cada par miRNA-mRNA em questão. O método se destaca pela eficiência no uso de memória e processamento ao utilizar o formato dos dados em duas dimensões, não precisando guardar os atributos de entrada uma vez para cada par miRNA-mRNA. Além disso, o modelo carrega toda a explicabilidade das árvores de decisão, de suma utilidade na tarefa de desvendar os processos biológicos.

Palavras-chave: microRNA. Predictive Bi-clustering tree. Interação miRNA-alvo. Extração de características de sequências biológicas.

Referências:

1 PLIAKOS, K.; GEURTS, P. VENS, C.. Global multi-output decision trees for interaction prediction. **Machine Learning**, v. 107, n. 8, p. 1257-1281, 2018.
2 JONAS, S.; IZAURRALDE, E.. Towards a molecular understanding of microRNA-mediated gene silencing. **Nature Reviews Genetics**, v. 16, n. 7, p. 421-433, 2015.
3 CHIPMAN, L. B.; PASQUINELLI, A. E. miRNA targeting: growing beyond the seed. **Trends in Genetics**, v. 35, n. 3, p. 215-222, 2019.

388

PG205

Nova física fundamental em astropartículas: invariância de Lorentz

DALLOUL, H. Y.[1]; SOUZA FILHO, L. V.[1]

habibb.yd@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A produção de partículas energéticas no Universo continua sendo um dos grandes mistérios da ciência moderna. Os mecanismos de aceleração de partículas em fontes astrofísicas são ainda desconhecidos, e resultados recentes apontam para a necessidade de uma abordagem multi-mensageiro para resolver este problema. A interpretação dos dados medidos depende do conhecimento das propriedades das interações entre partículas, em escalas de energias inalcançáveis por experimentos terrestres. Desta forma, a análise das partículas cósmicas pode trazer informações preciosas sobre objetos astrofísicos bem como sobre as interações elementares da natureza. Este projeto foca em aspectos de física fundamental em astrofísica de partículas. Estudaremos a possibilidade de detecção ou imposição de limites na quebra de invariância de Lorentz relacionados com a propagação de partículas energéticas, com foco na radiação gama de altas energias. (1) Os trabalhos deste projeto estão inseridos dentro dos esforços experimentais dos Observatórios CTA, que possuem um limiar de detecção em fluxo cerca de 10 vezes mais baixo do que outros observatórios em funcionamento. Essa potencialidade pode ser explorada na possibilidade de detecção na diferença do tempo de chegada de fótons emitidos simultaneamente. (2)

Palavras-chave: Quebra de invariância de Lorentz. Raios cósmicos. Astrofísica de partículas.

Referências:

1 MARTINEZ-HUERTA, H.; LANG, R.; SOUZA, V. Lorentz invariance violation tests in astroparticle physics. **Symmetry**, v. 12, n. 8, July 2020. DOI 10.3390/sym12081232. 2 DORO, M. *et al.* Dark matter and fundamental physics with the Cherenkov Telescope Array. **Astroparticle Physics**, v. 43, p. 189-214, 2013. DOI: 10.1016/j.astropartphys.2012.08.002.

389

PG206

Simetria e métrica para hamiltonianos não-hermitianos dependentes do tempo

SILVA, L. F. A.[1]; DOURADO, R. A.[1]; MOUSSA, M. H. Y.[1]
silvaluis@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A condição de $\mathcal{PT}$-simetria, introduzida por Carl Bender e Stefan Boettcher (1) foi fundamental para a compreensão de sistemas físicos descritos por hamiltonianos não-hermitianos com autovalores reais e vem sendo um importante objeto de estudo, teórico e experimental, no campo da mecânica quântica não-hermitiana. Além da realidade do espectro, em geral, a $\mathcal{PT}$-simetria garante a existência do operador métrica e a pseudo-hermiticidade dos hamiltonianos não-hermitianos, conceitos esses desenvolvidos por Mostafazadeh (2) e que resolve o problema da unitariedade da evolução temporal de um sistema não-hermitiano. Além disso, Mostafazadeh considerou hamiltonianos autônomos para mostrar que existe uma simetria antilinear $\mathcal{I}$ independente do tempo, como a $\mathcal{PT}$-simetria, que satisfaz a relação de comutação $[\mathcal{I}, H] = 0$ e permite a pseudo-hermiticidade dos hamiltonianos não-hermitianos. Métodos para a abordagem de hamiltonianos pseudo-hermitianos não-autônomos foram também desenvolvidos na literatura 3) e, neste trabalho, apresentamos um desenvolvimento para a derivação de um operador de simetria antilinear $\mathcal{I}(t)$ geral sob o qual o hamiltoniano não-hermitiano $H(t)$ seja invariante. O método foi aplicado ao hamiltoniano dependente do tempo de um modo da cavidade sob amplificação linear $H_1 = \omega a^\dagger a + \alpha a + \beta a^\dagger$ e quadrática $H_2 = \omega a^\dagger a + \alpha a^2 + \beta a^{\dagger 2}$ e obtemos operadores de simetria do tipo $\mathcal{I}(t) = \Lambda(t)R(t)\mathcal{T}$ onde $\Lambda(t)$ é um operador de deslocamento (caso linear) ou de *squeezing* (caso quadrático), $R(t)$ é o operador de rotação no espaço de fase e $\mathcal{T}$ é o operador de reversão do movimento. As simetrias dependentes do tempo obtidas foram particularizadas para os hamiltonianos $\mathcal{PT}$-simétricos equivalentes, o que nos permitiu verificar que a $\mathcal{PT}$-simetria é um caso bastante particular daqueles que permitem a pseudo-hermiticidade de hamiltonianos não-hermitianos. Os resultados nos fornecem ingredientes para uma melhor análise e interpretação física de sistemas não-hermitianos com simetria antilinear além da $\mathcal{PT}$.

Palavras-chave: Simetria dependente do tempo. Hamiltonianos não-hermitianos. Pseudo-hermiticidade.

Referências:

1 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having $\mathcal{PT}$-symmetry. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 24, p. 5243-5246, 1998.
2 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-hermiticity versus $\mathcal{PT}$-symmetry: the necessary condition for the reality of the spectrum of a non-hermitian hamiltonian. **Journal of Mathematical Physics**, v. 43, n. 1, p. 205-214, 2002.
3 FRING,A.; MOUSSA, M. H. Y. Unitary quantum evolution for time-dependent quasi-hermitian systems with nonobservable hamiltonians. **Physical Review A**, v. 93, n. 4, p. 042114-1-042114-5, 2016.

390

PG207

When clock and system interact: Page-Wootters' mechanism

MENDES, L.[1]; SOARES PINTO, D. O.[1]

lrs.mendes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

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 laboratory. 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.

Palavras-chave: Page-Wootters mechanism. Superselection rules. Quantum clocks

Referências:

1 VACCARO, J .A. Quantum asymmetry between time and space. **Proceedings of the Royal Society A**, v. 472, n. 20, p. 20150670, 2016. 2 PAGE, D. N.; WOOTTERS, W. K. Evolution without evolution: dynamics described by stationary observables. **Physical Review D**, v. 27, n. 12, p. 2885, 1983. 3 WICK, G. C.; WIGHTMAN, A.; SWIGNER, E. P. The intrinsic parity of elementary particles. **Physical Review D**, v. 88, n. 1, p. 101, 1952.

PG208

Análise evolutiva e estrutural de genes associados ao diabetes mellitus tipo 2

MOTA, D.[1]; MARCO, R.[1]; SETUBAL, J. C.[2]

diogomaciel@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]IQ - USP

Diabetes Mellitus (DM) é um grupo de doenças metabólicas caracterizadas por hiperglicemia resultante de defeitos na secreção de insulina, ação de insulina ou ambos os casos. A maioria dos casos registrados de DM encontra-se em duas categorias: Diabetes Mellitus Tipo 01 (DM1), caracterizada por uma deficiência absoluta de insulina, provocada por um processo patológico autoimune nas ilhotas pancreáticas e nos marcadores genéticos; e Tipo 02 (DM2), uma combinação de resistência à ação, com uma resposta ineficiente à secreção da insulina, o DM2 está presente entre 90 95% dos casos da doença. (1) Deve-se notar, que o DM2 é uma doença multifatorial onde as contribuições individuais de cada mutação tendem a ser moderadas. Isso sugere que a maioria das mutações não irá gerar um cenário catastrófico, como perda de atividade de uma proteína ou completa desestruturação de um gene. De fato, devido à alta prevalência dos alelos relacionados ao DM2 pressupõe-se que durante a evolução da espécie humana estes apresentariam caráter positivo ou próximo de neutro. A manifestação do DM2 é dependente de alelos mutantes em múltiplos loci gênicos, onde a interação entre eles e o ambiente serão determinantes na manifestação da síndrome. Essa alta prevalência do DM2 em populações humanas representa um enigma evolutivo, visto que seria esperado que mutações deletérias fossem eliminadas pela seleção natural. (2) Com os avanços em genômica, após o término do Projeto Genoma Humano, tivemos um crescente conhecimento de como *single nucleotide polymorphisms* (SNPs) afetam a saúde humana, além de reduzir, de forma significativa, os custos para sequenciamentos de genomas inteiros, facilitando o desenvolvimento da medicina genética individualizada. Estudos de Associação Ampla do Genoma (*Genome-Wide Association Studies* - GWAS) permitiram a descoberta de variações genéticas comuns, contribuindo para características normais e patológicas, e respostas a medicamentos clínicos, mas reconhecer os alvos precisos dessas associações é agora o maior desafio. Diversos GWAS associados ao DM2 foram realizados e permitiram a identificação de um grande número de loci relacionados com uma maior suscetibilidade ao fenótipo da doença. Atualmente, há, pelo menos, 537 sinais distintos de associação ao DM2, atribuídos a 325 loci. (3) O acúmulo de evidências adicionais, fornecendo indícios que mudanças no padrão de *splicing* são um fator importante na manifestação do DM2, pode ser uma importante contribuição para o entendimento da doença. Seria relevante, também, entender se a alta prevalência de SNPs associadas ao DM2 estaria associada à modificação de padrões de expressão em genes que seriam mais permissivos a este tipo de mudança ao longo da evolução, o que explicaria a baixa pressão seletiva associada as SNPs.

Palavras-chave: Diabetes mellitus. Single nucleotide polymorphism. Genome-wide association studies.

Referências:

1 AMERICAN DIABETES ASSOCIATION. 2.classification and diagnosis of diabetes: standards of medical care in diabetes - 2019. **Diabetes Care**, v. 42, S. 1, p. S13-S28, 2019. 2 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, 23 jan. 2013. 3 MAHAJAN, A. *et al*. Fine-mapping type 2 diabetes loci to single-variant resolution using high-density imputation and islet-specific epigenome maps. **Nature Genetics**, v. 50, n. 11, p.1505-1513, 8 out. 2018.

393

PG209

Prospecção da interface de interação no processo de polimerização da enzima glutaminase C

ABREU, F. M. O.[1]; RODRIGUES, C. T.[1]; DIAS, S. M. G.[2]; AMBRÓSIO, A. L. B.[1]
flavia.abreu@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]LNBio/CNPEM

As vias glicolítica e glutaminolítica se apresentam alteradas no câncer a fim de atender às demandas energéticas e biossintéticas crescentes. A glutamina é um dos nutrientes essenciais para o metabolismo tumoral, sendo convertida em glutamato pelas enzimas glutaminases, codificadas em mamíferos por dois genes distintos, GLS e GLS2. Dentre as isoformas existentes, a glutaminase C (GAC) é crucial, encontrando-se em abundância em diferentes linhagens tumorais. (1) Organizando-se em diferentes estruturas, pode apresentar variações quanto à sua eficiência, sendo o tipo mais ativo caracterizado pela formação de filamentos helicoidais na presença de fosfato inorgânico. (2) De acordo com estudos prévios de nosso grupo, a oligomerização se daria pelo empilhamento lateral dos tetrâmeros da proteína. No entanto, ainda é necessário confirmar o modelo proposto para a polimerização e ativação da proteína na célula. Assim, planejamos mutações sítio-dirigidas dos filamentos e realizamos expressão heteróloga em *E. coli* em larga escala. A proteína selvagem e as mutantes passaram por três etapas de purificação (cromatografia de afinidade a metais imobilizados, troca iônica e exclusão molecular). Para avaliar a formação ou não dos filamentos e a estabilidade da enzima selvagem e mutantes, estão se conduzindo testes de *Dynamic Light Scattering* (DLS). As potenciais mudanças na atividade enzimática, decorrentes da não formação dos polímeros estruturados, também serão monitoradas indiretamente, acompanhando-se a produção de NADH durante conversão do glutamato formado pela GAC em α-cetoglutarato pela enzima glutamato desidrogenase (GDH), pela absorção de luz de comprimento de onda 340 nm. Todas as análises são feitas com e sem incubação em fonte de fosfato inorgânico, em triplicatas técnicas e biológicas. Resultados preliminares indicam que as mutações planejadas estão relacionadas com a inibição da formação dos filamentos nas mesmas condições, em contraste com a proteína selvagem. Dessa forma, a melhor compreensão sobre o mecanismo de oligomerização e ativação da GAC pode estabelecê-la como um promissor alvo molecular para o desenvolvimento de novas terapias antitumorais.

Palavras-chave: Glutamina. Enzimas. Metabolismo de proteína.

Referências:

1 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 Sciences of the United States of America**, v. 109, n. 4, p. 1092–1097, 2012. 2 FERREIRA, A. P. S. *et al.* Active glutaminase C self-assembles into a supratetrameric oligomer that can be disrupted by an allosteric inhibitor. **Journal of Biological Chemistry**, v. 288, n. 39, p. 28009–28020, 2013.

394

PG210

Estratégias em modelagem molecular para a identificação de novos ligantes candidatos à fármacos para a leishmaniose

TELES, H.[1]; ANDRICOPULO, A. D.[1]; VALLI, M.[1]; FERREIRA, L. L. G.[1]

henrique.teles@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Leishmaniose é uma doença tropical negligenciada (DTN) que acomete cerca de 1 milhão de pessoas por ano, sendo que 1 bilhão de pessoas vivem em áreas endêmicas e correm o risco de ser infectadas. (1) A leishmaniose visceral, causada pelas espécies Leishmania donovani e Leishmania infantum, é a forma mais grave da doença com altas taxas de letalidade, especialmente se não tratada adequadamente. O tratamento disponível é complexo, deve ser aplicado por profissionais experientes, tem longa duração e alta toxicidade, e portanto, o desenvolvimento de novos fármacos específicos e eficazes para a leishmaniose visceral é de grande importância. O grupo de enzimas denominado aminoacil-tRNA sintetase (aaRS) são essenciais para a síntese de proteínas, responsáveis por indexar o aminoácido em tRNA específico, e portanto, vitais para o crescimento celular. A estrutura primária da MetRS de kinetoplastideos é razoavelmente diferente da de mamíferos e sugere seletividade. (2) No presente trabalho, a metionil tRNA-sintetase de Leishmania infantum (LiMetRS) foi utilizada como alvo molecular para a identificação de compostos com potencial atividade inibitória. A estrutura tridimensional da LiMetRS, não disponível previamente na literatura, foi predita utilizando a estratégia de modelagem por homologia tendo como templates para a construção do modelo a MetRS de espécies de Trypanosoma brucei e Leishmania donovani. Apesar de LiMetRS apresentar maior similaridade com LdMetRS, o template de TbMetRS utilizado se apresenta no estado-I caracterizado por uma série de alterações conformacionais que ocorrem quando a enzima está complexada com inibidor. Utilizando os parâmetros de propriedades moleculares dos inibidores reportados para TbMetRS (3), considerando a similaridade no sítio, foi realizada uma busca no subconjunto de moléculas do ZINC utilizando as faixas de $3.00 \leq \text{LogP} \leq 5.00$ e $300 \leq$ peso molecular ≤ 450 resultando em 5.340.480 compostos que foram selecionados para a docagem molecular. Os 10.000 melhores compostos, com base na função de pontuação, foram submetidos a uma nova docagem com parâmetros de eficiência maiores para aprimorar as poses dos ligantes. Em seguida, uma nova filtragem foi feita utilizando um programa escrito em Python pelo autor, para selecionar apenas os ligantes que interagem com aminoácidos específicos do sítio da LiMetRS, resultando em 222 ligantes, que foram submetidos a uma nova seleção com base na função de pontuação, resultando em 10 moléculas. Esse conjunto de moléculas despertam interesse, pois interagem com aminoácidos reportados como importantes para a estabilização do ligante no sítio de ligação em proteínas homólogas (TbMetRS), onde o sítio é altamente conservado (84,33% de similaridade) e portanto, possíveis inibidores de LiMetRS. Tais moléculas foram submetidas a estudos de dinâmica molecular para avaliação da estabilidade dos ligantes no sítio de ligação. A estratégia de seleção e predição do alvo antes não disponível, e aplicação de filtros na seleção de moléculas e ferramentas para avaliar a interação ligante-alvo, convergem para a identificação de novos ligantes com propriedades químicas e estruturais otimizadas que podem se tornar candidatos promissores à fármacos para LV.

Palavras-chave: SBDD. Leishmaniose. Aminoacil-tRNA sintetase.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Leishmaniasis**. Disponível em: https://www.who.int/health-topics/leishmaniasis. Acesso em: 21 Jun. 2021.
2 SHIBATA, S.*et al*. Selective inhibitors of methionyl-trna synthetase have potent activity against trypanosoma brucei infection in mice. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 55, n. 5, p. 1982–1989,2011
3 HUANG, W.*et al*. Structure-guided design of novel trypanosoma brucei methionyl-trna synthetase inhibitors. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v. 124, p. 1081–1092, 2016. DOI: 10.1016/j.ejmech.2016.10.024.

396

PG211
Matematização da ciência antes de Galileu

FERREIRA, C. T. T.[1]; SILVA, C. C.[1]
ciro.ferreira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A chamada Revolução Científica do século 17 é um dos eventos mais estudados da história da ciência, sendo seu próprio caráter revolucionário (i.e. de mudança descontínua) controverso entre os historiadores. Um dos critérios de separação entre a filosofia natural aristotélica e a ciência moderna estabelecidos pelos defensores da visão revolucionária é a implementação da linguagem matemática na descrição dos fenômenos naturais, principalmente por Galileu Galilei, na área da ciência do movimento. Denominada de tese da matematização, essa ideia encontra seus principais adeptos nos historiadores Alexandre Koyré, Edwin Burtt e Eduard Dijksterhuis do século 20, sendo posteriormente diluída e criticada. (1) Neste trabalho oferecemos um panorama da matematização da natureza anterior a Galileu, buscando contextualizar sua contribuição. Consideramos que a categoria histórica ao qual o corpo de conhecimento analisados pertencem é a filosofia natural, que inclui em seu escopo não apenas considerações sobre a natureza mas também sobre a maneira adequada de se obter conhecimento e justificá-lo como válido epistemologia). Partimos então de Platão e Aristóteles, que oferecem duas formas distintas de construir e interpretar o conhecimento matemático sobre o mundo que seriam apropriados por uma ampla variedade de pensadores posteriores. Passamos então pela exposição do Teorema do Valor Médio, que seria de grande importância para a abordagem galileana da queda livre, desenvolvido pelos Calculadores de Merton na Idade Média, discutindo ainda o contexto filosófico mais amplo no qual foi concebido. Por fim analisamos como outros pensadores renascentistas imediatamente anteriores ou contemporâneos a Galileu abordaram o movimento matematicamente, como foi o caso de Niccolò Tartaglia.

Palavras-chave: História da ciência. Galileu Galilei. Matematização.

Referências:

1 FERREIRA, C. T. T.; SILVA, C. C. The roles of mathematics in the history of science: the mathematization thesis. **Transversal**: international journal for the historiography of science, n.8, p.6-25, 2020. DOI: 10.24117/2526-2270.2020.i8.03.

397

PG212

Simple-Z: a portable and low-cost electrical impedance spectrometer for application in education and in biosensing

BUSCAGLIA, L. A.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[1]

lorenzo.buscaglia@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The acquisition of their frequency response is important in many physics and engineering systems, such as hanging bridges or noise filters. Since mechanical excitation usually requires big and expensive hardware, an alternative for education purposes is to use electrical systems, which are inexpensive and easy to mount. Through electrical impedance spectroscopy it is possible to determine resonance frequencies and establish equivalent circuits to simulate the systems. (1) However, commercial spectrometers are high-cost (> 1k USD), and this hampers their implementation in educational settings.(2) Currently this analysis is slow and manual, performed by coupling signal generators and oscilloscopes. In this project we developed Simple-Z, a portable and low-cost (100 USD) electrical impedance spectrometer. This price reduction allows for educational application, opening doors for simple and fast measurements. Furthermore, electrical impedance spectroscopy also has been used extensively for (bio)sensing purposes. In the last couple of decades, including in our group, several (bio)sensors have been produced based on electrical impedance for clinical diagnosis, food quality control and cell cultures monitoring.(2) A recent example of the application of Simple-Z in biosensing was the detection of genetic material of SARS-CoV-2 (Covid-19).(3)

Palavras-chave: Impedance spectroscopy. Instrumentation. Biosensors. Portable electronics. Education

Referências:

1 CHINAGLIA, D. L.; GOZZI, G.; ALFARO, R. A. M.; HESSEL. R. Espectroscopia de impedância no laboratório de ensino. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 30, n. 4, p. 1–9, 2008. DOI: 10.1590/s1806-11172008000400013.

2 SCAGLIA, L. A.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; CARMO, J. P. Roadmap for electrical impedance spectroscopy for sensing: a tutorial. **IEEE Sensor Journal**, 2021. DOI: 10.1109/JSEN.2021.3085237.

3 SOARES, J. C. *et al.* Detection of a SARS-CoV-2 sequence with Genosensors using data analysis based on information visualization and machine learning techniques. **ChemRxiv**, 2020. DOI: 10.26434/chemrxiv.13366379.v1. Disponivel em: https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/articledetails/60c752ee567dfed37eec5d90. Acesso em: 28 jun. 2021.

PG213
Genosensors on gold nano-islands to detect SARS-CoV-2

OITICICA, P. R. A.[1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.[1]; SOARES, J. C.[1]; SOARES, A. C.[2]; MELENDEZ, M. E.[3]

praoiticica@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Nanotechnology National Laboratory for Agriculture (LNNA) - Embrapa Instrumentaçao

[3]Pelé Little Prince Research Institute, Little Prince College - Curitiba

The COVID-19 pandemic demands rapid, low-cost and sensitive biosensor devices for detecting infections by the SARS-CoV-2 virus. This motivated our group to develop multiple biosensor platforms to detect the genetic material of SARS-CoV-2.(1) In this work, we produced biosensors containing an active layer of a specific capture DNA probe (cpDNA) deposited onto gold nano-islands (AuNI) on glass substrates, which were used to detect ssDNA fragments (positive ssDNA) of SARS-CoV-2.(1) Detection was made possible with localized surface plasmon resonance (LSPR) as the hybridization between the positive ssDNA of SARS-CoV-2 and cpDNA led to a redshift in the transmittance spectrum.(1-2) The high sensitivity of the LSPR device allowed for detecting ssDNA to a concentration of 10-10 mol L-1. The selectivity of the genosensor was confirmed using the multidimensional projection technique referred to as interactive document mapping (IDMAP), where the data from the positive ssDNA fragment could be clearly distinguished from the spectra for a negative DNA sequence (negative control). The optical detection of this genosensor will be further investigated using optical microscopy techniques and machine learning (ML) classification in order to simplify the optical detection and explore ML powered data analysis.

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Genosensor. Gold nano-islands.

Referências:

1 SOARES, J. C. *et al.* Detection of a SARS-CoV-2 sequence with genosensors using data analysis based on information visualization and machine learning techniques. **Materials Chemistry Frontiers**, 2021.No prelo.
2 QIU, G. *et al.* Dual-functional plasmonic photothermal biosensors for highly accurate severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 detection. **ACS Nano**, v. 14, n. 5, p. 5268–5277, 2020.

PG214

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

CHEROBIN, E.; ARAÚJO, A. P. U.[1]

eduardo.cherobin.martins@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Schistosoma mansoni é um platelminto parasitário, sendo um dos principais agente 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. 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 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 durante o processo de inserção do elemento. 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, os elementos pertencentes ao clado CR1 que codificam para proteínas contendo um domínio PHD apresentam uma grande proporção dos elementos que se inserem a pequena distância do sítio de início de transcrição do gene, 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.

Palavras-chave: Bioinformática. Elementos de transposição.

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, 2010.

PG215
Calibrating stock prices using Neural SDE's

SOUZA, H. R.[1]
humberto.souza@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

After years of experience, modern deep learning techniques are not showing major developments in time series analysis, specially because of the correlation between past events. This provoked the proposal of new techniques, fundamentally based on neural networks, but a different approach, such as the Neural Differential Equation framework (1), which states that a certain type of Neural Network is only an approximation using the Euler Method.
Using the same fundamental approach, the Neural Stochastic Differential Equation proposes that the parameters of the multi-dimensional random variable Y with the equation:

$$d\vec{y} = \vec{\mu}dt + \sigma d\vec{W}$$

Can be found using the equations stated by (2).
In this work, we are going to explore the capacities of this model in finding the necessary parameters to find the price of an option, using the stochastic volatility model, analyzing the long-term capacity of this framework.

Palavras-chave: Stochastic differential equations. Econophysics

Referências:

1 CHEN, R. *et al.* **Neural ordinary differential equations**. 2018. Available from: https://proceedings.neurips.cc/paper/2018/file/69386f6bb1dfed68692a24c8686939b9-Paper.pdf. Accessible at: 23 Jan. 2021.
2 LI, X. *et al.* **Scalable gradients for stochastic differential equations**. 2020. Available from: http://proceedings.mlr.press/v108/li20i/li20i.pdf. Accessible at: 23 Jan. 2021.

401

PG216

Influência de algumas características topológicas na estabilidade e complexidade de redes neurais aleatórias.

TEODOSIO, N.
nathan.teodosio@usp.br

Em redes neurais artificias, cada neurônio é um nó e cada sinapse uma ligação dirigida da rede. Este estudo têm por objetivo avaliar a establidade de redes neurais artificais com parâmetros que as aproximem de redes neurais reais. São eles: esparsidade – dentre todas as ligações possíveis, apenas uma pequena quantidade realmente existe –, adequação à Lei de Dale – todo neurônio só pode enviar estímulos do mesmo tipo (inibitório ou excitatório), independentemente do tipo de cada neurônio alvo – e heterogeneidade da rede. Os resultados mostram se, e em que condições, a estabilidade da rede é preservada ao se imporem e ajustarem essas características. (1-2)

Palavras-chave: Redes neurais. Redes complexas. Estabilidade.

Referências:

1 RAJAN, K.; ABBOTT, L. F. Eigenvalue spectra of Random matrices for neural networks. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 18, p. 188104, 2006.
2 NEWMAN, M. Random graphs with clustering. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 5, p. 058701, 2009.

402

Índice de Autores

A

ABEGAO, L. 139, 144
ABREU, F. M. O. 394
AFONSO, R. 215, 298
AGOSTINHO, E. T. 54, 141
AGUERA, J. J. M. 214
AGUIAR, A. C. C. 169, 203, 242, 255
AKIYAMA, J. 40, 263
ALCARAZ, F. C. 207
ALETA, A. 178
ALMEIDA, I. C. 159
ALMEIDA, J. M. P. 149
ALMEIDA, L. B. 289
ALMEIDA, L. R. 355
ALVARENGA, L. N. C. 37
ALVES, F. 123, 295, 347
AMBRÓSIO, A. L. B. 113, 326, 394
ANDRADE, E. C. 135, 159, 179
ANDRADE, M. B. 136, 137
ANDRADE, M. M. 96
ANDREETA, M. 191
ANDRIANI, K. F. 69
ANDRICOPULO, A. D. 41, 181, 186, 253, 357, 395
ANTONIO, L. 180
ANTUNES, C. A. 171
ARAÚJO, A. P. U. 61, 165, 190, 365, 400
ARAI, M. S. 84
ARAUJO, R. N. 367
ARGENTIN, M. N. 248
ARMIJOS, M. A. M. 258
ARNOLDI, V. 153, 224, 237, 364
ARRUDA, H. F. 38
ATENCIO, D. 137
AUDI, G. 227
AYALA, E. T. P. 295

B

BACHELARD, R. 132
BAGNATO, V. S. . . 59, 74, 127, 160, 168, 183, 199, 235, 244, 258, 266, 278, 283, 310, 315, 324, 354, 366
BARBEDO, A. 102
BARBOSA, C. S. 203, 242
BARBOSA, M. G. 285
BARRA, A. L. C. 377
BARRERA-PATIÑO, C. P. 266
BARROS, L. W. T. 366
BARROS, M. 83
BELLINI, B. S. 289
BELLINI, N. K. 94
BELTRAMINI, L. M. 174
BENATTI, A. 38, 193
BERETA, S. 361
BERNARDES, A. 355
BERNARDINI, A. E. 328
BIRAL, E. J. 310
BISPO JUNIOR, A. G. 158
BLANCO, K. 57, 183, 301
BOCCHI, J. H. C. 275
BOITO, D. 245, 286, 349
BONAGAMBA, T. J. 191, 300
BONI, L. 40, 51, 119, 124, 139, 143, 144, 156, 195, 263
BORALLI, C. M. S. 62, 133
BORIN, D. 331
BORSATO, V. E. K. 267
BOSSOLAN, N. R. S. 248, 345
BRAMBILLA, G. V. 84
BRANDAO NETO, J. 365
BRAZ, D. C. 307
BRAZACA, L. 199
BRIHAYE, Y. 374
BRITO, F. B. 201, 230, 280

BROGNARA, G. 365
BROLO, A. G. 307
BRUNO, O. M. 158, 166, 246, 291
BUOZZI, M. T. 34
BUSCAGLIA, L. A. 398
BUZZÁ, H. H. 74, 199, 278, 315, 354

C
CABREJOS, D. A. L. 206
CALDERÓN, G. L. 222
CAMACHO, R. T. 46
CAMARGO, A. S. S. 84, 379
CAMARGO, I. L. B. C. . 47, 62, 133, 174, 261, 269
CAPETTI, C. 153
CAPITÃO, R. M. 255
CAPOBIANCO, R. A. 374
CARDOSO, D. R. 199
CARDOSO, M. 185
CARMO, R. S. 212
CARNIELLI, G. V. 47
CARRILHO, E. 199
CARVALHO, F. A. 115, 341
CARVALHO, I. 47, 62
CASTILHO, P. C. M. 35, 244, 258, 384
CASTILHO, R. F. 235
CASTRO NETO, J. C. 77, 118, 122, 126, 218, 219, 266
CEDRIM, D. 94
CENTURION, H. A. 287
CERQUEIRA, M. C. 330
CERRI, R. 387
CESARINO, V. 376
CHEROBIN, E. 400
CHIARELLI, M. 117
CIDRIM, A. 244
CILLI, E. M. 174, 343
CIPRIS, A. 132
CLEMENTINO, L. 217
COCCA, L. Z. 40, 139, 143, 144, 263
COMIN, C. H. 267
CONSOLE, F. 352
CORREA, A. S. 313
CORREIA, C. R. D. 255
CORREIA, D. S. 114
CORTEZ, A. 224
COSTA, C. 283
COSTA, F. R. F. 41
COSTA, G. F. 121
COSTA, L. F. 38, 129, 167, 312, 368, 385
COSTA, R. 144
COSTA, V. 91, 93
COURTEILLE, P. W. 240
COUTO, F. 369
CRUZ, M. D. 242
CUNHA, É. F. 312
CUNHA, P. H. C. 35
CURVELO, K. 232

D
D'ALMEIDA, C. P. 104, 115, 116, 341
DABUL, N. 153
DALLOUL, H. Y. 389
DIAS, L. 162
DIAS, L. C. 242
DIAS, L. D. 59, 147
DIAS, P. G. S. 240
DIAS, S. M. G. 394
DINIZ, G. 197
DINIZ, P. 234
DOLCI, I. 85, 87
DOMINGUES, G. S. 129
DONATO, M. H. F. 209
DOURADO, R. A. 390
DRINKO, A. 281
DUARTE, L. S. 59

E
ECKERT, H. 381
EGUES, J. C. 329, 367
ELLENA, J. 108, 276
ENSUNCHO, L. 210
ESQUÉN, P. H. 269
ESTEVAO, B. M. 106

F
FACIOLI, M. L. 61
FAGIANI, J. 205
FARIA, C. 271, 283
FARIA, G. 216, 260, 275
FARIA, W. 379
FARIAS, K. M. 384
FASSIO, A. 146
FEITOR, J. F. 199
FERNANDES, A. 204

404

FERNANDES, P. M. P. 199
FERNANDES, R. S. 85, 87, 343, 350
FERNANDEZ, M. F. 240
FERRARI, A. L. 241
FERREIRA, C. T. T. 397
FERREIRA, G. C. 354
FERREIRA, J. F. 345
FERREIRA, L. A. 170
FERREIRA, L. L. G. 253, 395
FERREIRA, L. M. B. 106
FERREIRA, P. R. 149
FIUSA, G. 213
FLORENTINO, B. R. 39
FOERSTER, B. U. 191
FONSECA, M. S. 38
FONTANARI, J. F. 39, 53, 252, 274
FONTOLAN, L. S. B. 383
FRAJACOMO, H. C. 387
FRANCA, D. 119
FREIRE, B. 80
FREIRE, M. C. L. C. 306, 343, 350
FRITSCH, A. 244
FURUTA, R. H. M. 167

G
GÜNTHER, F. 216
GALANTE, D. 214
GALHASE, G. B. 103
GALINDO, D. M. 40, 263
GAMEZ, Y. M. 324
GARCIA, M. R. 115, 116, 121
GARCIA, R. 156
GARRATT, R. 204, 206, 228, 365, 375
GIL, L. H. V. G. 85
GILER, A. G. D. 257
GODOY, A. 306, 343, 350
GODOY, M. O. 306, 343
GOENAGA, L. 160
GOETTEMS, E. I. 215
GOMES, N. D. 140
GOMES, S. 199
GONÇALVES, D. 78, 307
GONÇALVES, R. V. 43, 81, 98, 287, 313
GRANDIN FILHO, P. G. 57
GREGÓRIO, G. M. 290
GREJO, M. 355
GROSSI, C. H. 208
GUERIN, W. 132
GUIDO, R. C. 362
GUIDO, R. V. C. 146, 169, 203, 242, 255, 306, 343
GUIMARÃES, F. E. G. 265, 316, 321, 335
GUTIERREZ, R. F. 292
GUTTIERREZ, E. D. M. 384

H
HARTMANN, B. 290, 352, 374
HENN, E. 37, 54, 55, 164, 234, 258
HENRIQUE, F. R. 49
HERNANDES, A. C. 149
HIGASI, P. M. R. 239
HU, C. 325
HUANAMBAL, P. 133

I
IKEDA, H. 381
ILIDIO, P. 387
INADA, N. M. 74, 160, 162, 168, 199, 235, 271, 278, 324, 354
ISRAEL, I. 386
ISSA, M. 94

J
JASINEVICIUS, G. O. 74, 278
JOCHELAVICIUS, K. 323
JORGE, G. H. A. 89
JUSTINO, L. R. 101

K
KAISER, R. 132
KALA, D. R. B. 47
KAMIZAKI, L. P. 148, 173
KANE, A. O. 364
KASSAB, G. 74, 199, 278, 315, 341
KOIDE, T. 67, 68
KOMORIZONO, A. A. 65
KURACHI, C. 74, 121, 127, 147, 160, 194, 199, 265, 278, 315, 324, 347, 354
KURAMOTO, C. Y. 116, 341

L
LÍBERO, V. L. 131
LARINE, H. M. 78
LEAL JUNIOR, J. M. 155
LEAL, A. C. S. 300
LEMES, M. F. S. 233

405

LEONARDO, D. 365
LIMA, G. 350
LIMA, M. 33
LIMBERGER, J. 144
LINS, P. M. P. 70, 76
LIVRAMENTO, L. R. 170
LONDON, C. Y. M. 349
LOPES, G. A. C. 137
LOPES, J. L. S. 174
LOPES, R. G. 271
LUCHESI, A. C. F. 291

M
MÓLLER, N. 310
MACHADO, S. 118, 126
MADEIRA, L. 33, 244
MAGNANI, P. H. N. 240
MAGNO, G. F. 208
MAIA, L. P. 318, 386
MALAVAZI, A. H. A. 201
MAMANI, E. C. 165
MARCASSA, L. G. 140, 151, 157, 185
MARCO, R. 326, 392
MARCOLAN, J. 188
MAREGA JUNIOR, E. 222, 233
MARQUES, M. J. A. M. 194
MARTINELLI, L. P. 121, 147
MARTINELLI, T. 130
MARTINEZ, V. J. 54, 141
MARTINS, T. T. 148, 173
MARTINS, W. 250
MASS, E. B. 186
MASSON, R. 296
MASTELARO, V. R. 65, 210
MATIAS, P. 176
MATTOS, V. S. 266
MEDEIROS, A. I. 271
MEDEIROS, A. R. 253
MEIRELES, V. D. 179
MELENDEZ, M. E. 399
MELO, N. 162
MENCATTINI, I. 44
MENDES, B. 76
MENDES, L. 391
MENDES, T. C. R. 155, 330
MENDONÇA, C. R. 49, 89, 102, 139, 144, 221, 232, 268
MENDONÇA, D. C. 228, 365
MENEZES, B. 49
MERENDA, J. V. 166
MERIZIO, L. G. 84
MEZZACAPPO, N. F. 168, 235
MILITAO, L. 108
MIRALHAS, V. 110
MIRANDA, P. B. 308, 317
MIRANDA, W. M. 368
MISOGUTI, L. 111, 144
MIZIARA, L. 76
MOMESSO, D. C. 73
MONTERO, M. A. 371
MONTES, R. S. 380
MORAES, J. Q. R. 221
MORAIS, F. O. 69
MORAZOTTI, N. A. 152
MOREIRA, N. A. 132
MORENO, M. 244
MORENO, Y. 178
MORGUETO, G. F. 382
MORIYAMA, L. T. 147
MOTA, D. 392
MOTTA, O. 196
MOURA, A. F. 272
MOURA, I. 169
MOUSSA, M. H. Y. 390
MOYSÉS, R. 111
MUNIZ, J. R. C. 269, 355
MUNIZ, S. R. . . . 103, 109, 110, 148, 173, 209, 231, 296, 320

N
NAKADA, P. J. T. 347
NAKAMURA, A. 306, 350
NAKANE, S. 381
NAPOLITANO, R. J. 152, 196, 227
NASCIMENTO, A. S. 204, 217, 292, 294, 350, 377
NASCIMENTO, C. S. 51, 124
NAVES, C. B. 202
NEVES, L. R. T. 280
NOGUEIRA, I. 91, 93
NOGUEIRA, V. H. R. 146, 343
NOSKE, G. D. 306, 343, 350
NUNES, P. 276

406

O
ODA, Y. S. 77, 219
OITICICA, P. R. A. 399
OLIANI, F. 286
OLIVA, G. 85, 87, 306, 343, 350
OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ..45, 251, 272, 299, 307, 323, 398, 399
OLIVEIRA, A. N. 90
OLIVEIRA, A. O. 218
OLIVEIRA, C. 184
OLIVEIRA, C. E. 223
OLIVEIRA, E. A. B. 303
OLIVEIRA, E. V. B. 90, 333
OLIVEIRA, G. A. 384
OLIVEIRA, J. P. R. 55
OLIVEIRA, L. F. M. 294
OLIVEIRA, L. N. 197, 241
OLIVEIRA, L. O. 218
OLIVEIRA, N. P. 104, 341
OLIVEIRA, V. G. F. 343, 350
OLIVIERO, F. G. 135
OROZCO, A. D. G. 244, 258
OTUKA, A. J. G. 89, 221

P
PAIVA, F. F. 123, 191, 362
PALMA, N. B. 308
PASTORE, A. M. 163
PAULA, K. T. 268
PAULA, T. 288
PAULI, I. G. 82
PEDRIZ, I. S. 106
PELLEGRINI, V. O. A. 211
PELOSI, A. 139, 143, 144
PENA, A. B. 226
PENTEADO, M. Z. C. 45
PEREIRA, G. G. D. 275
PEREIRA, H. 350, 365
PEREIRA, J. A. 70
PEREIRA, R. G. 135
PEREZ, A. S. 235
PICOLI, F. D. 131
PIETRO, N. 50
PIGUEL, S. 139, 143
PIMENTEL, L. P. 122
PINTO, D. S. 298
PINTO, F. 316
PINTO, R. D. 289, 376
PINTO, V. P. 44
POLICASTRO, L. R. 85, 87
POLIKARPOV, I. 153, 211, 224, 237, 239, 347, 364
PORTUGAL, R. V. 228
PRATAVIEIRA, S. 64, 104, 115, 116, 171, 295, 321, 341
PUPIM, L. 329

Q
QUEIROZ, A. E. 136
QUEIROZ, G. E. T. 362
QUITIBA, J. 75

R
RABELO, L. 98
RAMOS, L. 207
RAMPIM, A. 231
RAMPONI, T. C. 360
REDIN, G. G. I. 307
REGUERA, C. R. M. 151
REIS, F. P. 199
REIS, I. 339
REIS, L. A. 252
REIS, R. 67, 68
RESENDE, B. M. F. 385
RIBEIRO, L. V. 273
RIBOVSKI, L. 180
RIGHETTO, G. M. 174
RIOS, A. L. V. 133
RIVERA, V. A. G. 222
RIVERO, D. 373
ROATI, G. 244
ROCHA, L. E. R. 268
RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ, D. 157
RODRIGUES, A. C. 382
RODRIGUES, C. T. 394
RODRIGUES, F. A. 46, 130, 178
RODRIGUES, M. V. 245
RODRIGUES, N. E. 353
ROSA, H. V. D. 350, 355, 365
ROSA, W. 98
RUGGIERO, C. A. 176
RUSSOWSKY, D. 181, 186

S
SADRAEIAN, M. 316

407

SALAZAR, J. R. M. 251
SALCEDO, D. L. P. 357
SALCEDO, E. G. I. 384
SALDIVA, P. H. N. 321
SALOMON, B. 100
SAMANIEGO, L. V. B. 237
SANT'ANNA JUNIOR, A. B. 318
SANTARELLI, M. C. 128
SANTILLAN, J. A. V. 206
SANTO, R. D. E. 255
SANTO, T. S. E. 132
SANTOS FILHO, N. A. 174
SANTOS, A. C. 90, 325, 332, 333, 336
SANTOS, A. M. S. 81
SANTOS, B. N. 164
SANTOS, C. 72
SANTOS, C. H. 195
SANTOS, F. E. A. 310
SANTOS, J. 355
SANTOS, J. P. C. 113
SANTOS, K. F. 299
SANTOS, M. L. 381
SANTOS, N. V. 321
SANTOS, R. A. C. 387
SANTOS, S. M. B. 127
SANTOS, S. N. C. 34, 49
SANTOS, V. C. 332
SARAIVA, E. R. 337
SARRIA, J. J. H. 251
SCABINI, L. 246
SCHNEIDER, J. F. 382
SCIUTI, L. 139, 143, 144
SECUNDINO, J. P. A. S. 77
SEPULCHRO, A. G. V. 211
SETUBAL, J. C. 392
SILVA JUNIOR, J. T. 176
SILVA, C. C. 226, 397
SILVA, C. F. 328
SILVA, E. 236
SILVA, G. V. 133, 261
SILVA, J. L. F. 69, 358
SILVA, L. A. J. 230
SILVA, L. F. A. 390
SILVA, P. A. 65
SILVA, P. F. 320
SILVA, R. M. 375
SILVAI, C. C. 337
SIPAHI, G. 50, 82, 100, 223, 305, 358
SIQUEIRA NETO, N. S. 190
SIQUEIRA, A. 305
SIQUEIRA, C. 205
SIQUEIRA, W. C. A. 218
SOARES PINTO, D. O. ... 123, 130, 202, 208, 212, 213, 215, 250, 281, 391
SOARES, A. C. 399
SOARES, J. C. 162, 399
SOARES, J. M. 183
SOBRAL, J. A. S. 135
SOLCIA, G. 191
SOUSA, A. N. G. D. D. 224, 261
SOUSA, D. B. 105
SOUSA, M. S. 317
SOUZA FILHO, L. V. 318, 389
SOUZA, E. P. 343
SOUZA, G. 169, 203, 265
SOUZA, H. R. 401
SOUZA, L. 169
SOUZA, M. 41
SOUZA, M. O. 64
SOUZA, M. S. 181, 186
SOUZA, P. J. P. 325
SOUZA, R. F. S. 260
SOUZA, V. 71, 184, 205, 257, 288
SOUZA, Y. T. 53
STRINGASCI, M. D. 96
SUKERI, A. 78

T

TÓRTURA, H. A. 274
TAGUCHI, F. 218
TANNÚS, A. 114, 188
TAVARES, M. D. S. 149
TAVARES, P. E. 244
TEIXEIRA, R. C. 240
TELES, H. 395
TELLES, G. 258
TEODOSIO, N. 402
THIEMANN, O. 383, 387
TOMÉ, A. J. B. 74, 278, 354
TOMÉ, F. A. 71
TOMISHIYO, G. 128
TORRES, M. L. 185
TOVAR, J. S. D. 74, 199, 278, 315
TRANZIL, V. T. R. 83

408

TRAVIESO, G. 163

U
UNIGARRO, A. D. P. 216

V
VACILOTTO, M. M. 211
VALENTE, D. M. 215
VALLI, M. 395
VANZELLA, D. A. T. 282, 285, 331
VASCO, B. 109
VASQUES, E. M. 299
VELOSO, B. A. 336
VENTURA, P. C. 178
VERAS, M. M. 321
VERCESI, A. E. 235
VIANA, A. 73
VICENTE, M. L. F. 321
VILLAS-BOAS, C. J. 132, 325, 332, 333
VOLLET FILHO, J. D. 127, 160, 168, 324

W
WANDERLEY, A. B. 358
WEISS, P. 132
WESTIN, R. 282
WRENGER, C. 292

Y
YAMAZAKI, H. 381
YASUOKA, F. 118
YU, D. 325

Z
ZAGO, L. A. 335
ZAMPAULO, L. G. T. 43
ZANGIROLAMI, A. 301
ZANINI, C. 255
ZAPATA, J. C. B. 272
ZENATTI, L. 261
ZERI, A. C. M. 350
ZUCOLOTTO, V. . . 70, 75, 76, 106, 180, 236, 273, 371
ZUVANOV, L. 113, 326

409

410

411

PATROCÍNIO

Agilent

CEREBRA

chipus

DNA CLUB

dna8consult

editora cubo

LAC PRODUTOS LABORATORIAIS

THORLABS

ZARP

APOIO

FAFQ

SBIifsc