

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

**XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2022**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

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

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

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

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

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

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Titulo

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

PG158

Nanopartículas de fuligem isoladas agindo como uma fonte eficiente de oxigênio singlet: efeitos da agregação molecular e sua estrutura energética

VICENTE, Maria Luiza Ferreira; PRADO, Ana Glavocic de Almeida; SANTOS, Nathália Villa dos; VERAS, Mariana Matera; PRATAVIEIRA, Sebastião; SALDIVA, Paulo; GUIMARAES, Francisco Eduardo Gontijo

maria.luiza.vicente@usp.br

As nanopartículas de fuligem (NP) possuem propriedades que as tornam capazes de agir como fotossensibilizadores (do inglês - *photossensitizer* - PS), neste trabalho, mostramos que estas são uma fonte eficiente de oxigênio singlet (1O_2) com 1O_2 quantum yield dependente das múltiplas etapas fotofísicas que regem a transferência de energia dos estados tripletos no volume para sua superfície.(1) O material foi coletado por filtragem do ar da cidade de São Paulo (FNP), obtido diretamente do escapamento de ônibus (DEP) ou pulmão humano (LNP) e a morfologia foi analisada pela Dispersão Dinâmica de Luz (do inglês – *Dynamic Light Scattering* - DLS) e Microscopia eletrônica de Transmissão (do inglês – *Transmission Electronic Microscopy* - TEM). Suspendemos as subunidades formadoras da fuligem em uma solução aquosa alcalina e outra neutra, a microscopia confocal foi usada para caracterizá-las em termos de sua emissão, componentes de absorção e espalhamento de dois fótons (2P), bem como uma medida indireta da capacidade de gerar 1O_2 nos respectivos meios, usando uma sonda fluorescente padrão. As nanopartículas suspensas são centros espalhadores eficientes, sendo os comprimentos de onda mais curtos mais sensíveis ao espalhamento ($A\lambda^{-1}$). Usando essa relação com $n = 1$, determinamos pela primeira vez através de uma medida direta, a fração de absorção de uma subunidade nanométrica de fuligem que se estende do ultravioleta (250 nm) ao infravermelho próximo (800 nm). A absorção nos domínios do visível e infravermelho tem origem em suas transições ópticas de agregados moleculares estáveis de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs) do tipo J. Por outro lado, a absorção ultravioleta está mais provavelmente relacionada aos agregados moleculares do tipo H, uma vez que estes são extremamente seletivos para excitação 2P. Para pHs mais ácidos, o tamanho do aglomerado causa um *red shift* no espectro de absorção. Mostrou-se que o arranjo espacial dos HPAs favorecem a formação de estados tripletos dentro do volume das nanopartículas e guiam esses estados excitados eficientemente para sua superfície através de processo de transferência de energia ao longo de uma estrutura energética semelhante a uma escada. Essas condições são necessárias para gerar oxigênio singlet com 34% de eficiência em um meio aquoso. A ampla densidade dos estados agregados causa o *repump* do *photon up-conversion* e promovem a migração do estado excitado fazendo com que o espectro de emissão de fluorescência mude para o vermelho, cuja forma de linha é determinada pela densidade dos estados nesta faixa espectral.(2) No presente trabalho mostramos que a dispersão de luz domina os processos ópticos de nanopartículas de fuligem suspensas em meio aquoso com características espectrais únicas da forma $A\lambda^{-1}$. Os estados eletrônicos moleculares responsáveis pela absorção óptica foram obtidos a partir da subtração da dispersão originárias de agregados de HPAs, conforme revelado por medidas de absorção seletiva de 2P. A estrutura espacial dos estados agregados nas nanopartículas é responsável por todos os processos fotofísicos (*up-conversion*, *red emission*) e fotoquímicos (geração de 1O_2). Todas essas características são encontradas em FNP, DEP e LNP, o que permite sua identificação

inequívoca em tecidos humanos e no ambiente.(3)

Palavras-chave: Oxigênio singuleto. Nanopartículas de poluição. Photon up-conversion.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 OSSOLA, R. *et al.* Singlet oxygen quantum yields in environmental waters. **Chemical Reviews** v.121,p.4100-4146, Apr.2021.
- 2 TU, Y. *et al.* Aggregate science: much to explore in the meso world. **Matter**, v. 4, n. 2, p. 338-349, 2021.
- 3 BOVE, H. *et al.* Ambient black carbon particles reach the fetal side of human placenta. **Nature Communications** v. 10, n.3866,2019.