

# *LIVRO DE RESUMOS*



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

**III Semana Integrada  
do Instituto de Física de São Carlos  
SIFSC 3**

**Livro de Resumos**

**São Carlos  
2013**

## **Universidade de São Paulo**

|             |                        |
|-------------|------------------------|
| Reitor      | João Grandino Rodas    |
| Vice-Reitor | Helio Nogueira da Cruz |

## **Instituto de Física de São Carlos**

|              |                                   |
|--------------|-----------------------------------|
| Diretor      | Antonio Carlos Hernandez          |
| Vice-Diretor | Osvaldo Novais de Oliveira Junior |

## **Normalização e revisão – SBI/IFSC**

Ana Mara Marques da Cunha Prado  
Maria Cristina Cavarette Dziabas  
Maria Neusa de Aguiar Azevedo  
Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos  
(3. : 30 set. - 04 out. : 2013: São Carlos, SP.)  
Livro de resumos / Organizado por Luiz F. V. de  
Sena [et al]. São Carlos: IFSC, 2013.  
368 p.

Texto em português.

1. Física. I. Sena, Luiz F. V. de. II. e Silva, Ivan R.  
III. Carvalho, Milena M. IV. Batista, Pedro I. S.  
V. Ribeiro, Amina S. L. VI. Título.

CDD 530



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

# Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

*SIFSC 3*

## Coordenadores

Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandez

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

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

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

## Comissão Organizadora

Amanda C. Zangirolami

Amina Solano Lopes Ribeiro

André Henrique Senhorino Teschke

Daniel Cavallini

Diogo Lima Barreto

Edmilson Roque dos Santos

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Hernan Franco Romera Fazzio

Ivan Rosa e Silva

Jessica Dipold

João P. M. Fogo

Luiz F. V. Sena

Marcelo Saito Nogueira

Marcos R. B. Rodrigues

Mariana Z. T. de Lima

Milena Menezes Carvalho

Natalia Karla Bellini

Pedro Ivo Silva Batista

Rodolfo Assumpção Zavan

Thiago Martins Amaral

Vicente Mattos

Vitor Eulálio Reis

## Carta de apresentação

A Terceira Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos (SIFSC 3) mantém seu caráter inter e multidisciplinar, com programação científica de alto nível idealizada de forma a atender aos alunos de graduação em Física, Física Computacional e Ciências Físicas e Biomoleculares e alunos de pós-graduação em Física e Física Aplicada do IFSC-USP. O papel do Físico no mercado de trabalho será destacado pelas diferentes empresas convidadas. Além da agenda científica, o evento também conta com uma programação cultural intensa e diversificada, oferecendo aos alunos do IFSC-USP a oportunidade de revelarem suas habilidades artísticas.

A SIFSC 3 é um evento organizado por alunos de graduação e pós-graduação do IFSC-USP, que dividem tarefas que incluem a escolha e o convite de palestrantes externos, auxílio na captação de recursos, divulgação, coordenação de atividades e diálogo com servidores técnico-administrativos. Neste ano, esperam-se cerca de 550 participantes entre alunos, avaliadores, palestrantes e convidados de empresas. A organização de um evento deste porte torna-se, portanto, um grande aprendizado profissional aos envolvidos.

A apresentação dos trabalhos científicos desenvolvidos no IFSC-USP na forma de pôster nos Workshops de Iniciação Científica e de Pós-Graduação ocorrerá de forma unificada no quarto dia do evento, proporcionando aos participantes um ambiente para discussão científica e para integração de alunos, professores e pesquisadores. Os trabalhos científicos de destaque receberão o Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas, criado em 2011 por iniciativa da diretoria para prestigiar trabalhos científicos de alto nível desenvolvidos no IFSC-USP, que chega à sua terceira edição com mais de 60 inscritos.

A Comissão Organizadora agradece o total apoio da diretoria do IFSC-USP, às Comissões de Graduação e Pós-Graduação, aos servidores técnico-administrativos, aos palestrantes e empresas convidadas, aos avaliadores e à comunidade do IFSC e da USP São Carlos pela participação no evento.

*Comissão Organizadora da SIFSC 3*



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

# Sumário

## Workshop de Iniciação Científica

|                                                                                                                                                                                                       |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>IC1 - Desenvolvimento de novas matrizes mesoporosas sol-gel e a incorporação de materiais luminescentes orgânicos</b><br>ANJOS, C. F.; ECKERT, H.; SILVA, R. J. M. ....                            | 27 |
| <b>IC2 - Statistical features of neuronal avalanches and local field potentials</b><br>CARVALHO, M. M.; MOSQUEIRO, T. S.; MAIA, L. P. ....                                                            | 29 |
| <b>IC3 - Nanopartículas magnéticas recobertas com ouro para aplicações em nanomedicina</b><br>FRANCO, F. F.; MARANGONI, V. S.; ZUCOLOTTI, V. ....                                                     | 30 |
| <b>IC4 - Comparison between alternating and continuous optical molasses</b><br>GOMES, N. D.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S. ....                                                                   | 31 |
| <b>IC5 - Uma análise da influência da altitude na performance do Cherenkov Telescope Array</b><br>LANG, R. G.; DE SOUZA, V. ....                                                                      | 33 |
| <b>IC6 - Isolamento de membranas de linhagem celular para aplicação em modelos de membrana em estudos de nanotoxicidade</b><br>LINS, P.; ZUCOLOTTI, V.; CANCINO, J. ....                              | 34 |
| <b>IC7 - Tempo de vida de fluorescência para detecção de melanoma</b><br>NOGUEIRA, M. S.; PIRES, L.; KURACHI, C. ....                                                                                 | 35 |
| <b>IC8 - Avaliação do tratamento in vitro das células do melanoma humano e murino através da terapia fotodinâmica com diferentes fotossensibilizadores</b><br>ONO, B. A.; PIRES, L.; KURACHI, C. .... | 37 |
| <b>IC9 - Avaliação de textura de solos utilizando espectroscopia de plasma induzido por laser - LIBS</b><br>ROMANO, R. A.; NICOLODELLI, G.; VILLAS BOAS, P.R.; FERREIRA, E. C.; MILORI, D.M.B.P. ..   | 39 |
| <b>IC10 - Sincronização de redes complexas</b><br>SANTOS, E. R. dos; RODRIGUES, F. A. ....                                                                                                            | 41 |

|                                                                                                                   |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>IC11 - Estudos estruturais e cinéticos da enzima desoxicitidilato desaminase de <i>Schistosoma mansoni</i></b> |    |
| SCORTECCI, J. F.; SERRÃO, V. H. B.; PEREIRA, H. D. P. ....                                                        | 42 |
| <b>IC12 - Geometrias clássicas e estrutura causal: uma abordagem sintética.</b>                                   |    |
| TEODORO, M. C.; GROSSI, C. H. F. ....                                                                             | 44 |

## Workshop da Pós-Graduação

|                                                                                                                                                                                                                                                                                       |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>PG1 - Building plant physiological models based at chlorophyll confocal fluorescence microscopy: Imaging data analysis and metabolic network information.</b>                                                                                                                      |    |
| ALMEIDA FILHO, H. A.; BRUNO, O. M. ....                                                                                                                                                                                                                                               | 45 |
| <b>PG2 - Hydrogenated amorphous silicon surface micromachined by femtosecond laser</b>                                                                                                                                                                                                |    |
| ALMEIDA, G. F. B.; CARDOSO, M. R.; AOKI, P. H. B.; CONSTANTINO, C. J. L.; LIMA JÚNIOR, J. D.; RODRIGUES, C. A.; COSTA, L. F.; MENDONÇA, C. R. ....                                                                                                                                    | 46 |
| <b>PG3 - Natural products and synthetic compounds in the cancer research: biological screening of new antimetastatic agents</b>                                                                                                                                                       |    |
| ALTEI, W. F.; SALUM, L. de B.; CHIARADIA, L. D.; SECHINI, M. N.; Evelyn Winter; MATTEI, B.; CANEVAROLO, R. I. R.; SOUZA, C.; DAGHESTANI, H. N.; SANTOS-SILVA, M. C.; CRECZYNSKI-PASA, T. B.; YUNES, J. A.; YUINES, R. A.; NUNES, R. J.; ANDRICOPULO, A. D.; DAY, B. W.; VOGT, A. .... | 47 |
| <b>PG4 - Probing the statistical properties of unknown texts</b>                                                                                                                                                                                                                      |    |
| AMANCIO, D. R.; ALTMANN, E.; RYBSKI, D.; OLIVEIRA JR, O. N.; COSTA, L. F. ....                                                                                                                                                                                                        | 49 |
| <b>PG5 - Synthesis and properties of bi-layered <math>BaTi_{1-x}Zr_xO_3</math> ceramics</b>                                                                                                                                                                                           |    |
| AMARAL, T. M.; HERNANDES, A. C. ....                                                                                                                                                                                                                                                  | 50 |
| <b>PG6 - Massa fotovoltaica de heterojunção orgânica</b>                                                                                                                                                                                                                              |    |
| AMORIM, D. R. B.; FARIA, R. M. ....                                                                                                                                                                                                                                                   | 52 |
| <b>PG7 - Estratégias para combinação da radiação ionizante e terapia fotodinâmica para tratamento de tumores</b>                                                                                                                                                                      |    |
| ANDRADE, C. T.; PIRES, L.; PAVONI, J. F.; BAFFA FILHO, O.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. ....                                                                                                                                                                                           | 53 |
| <b>PG8 - Desenvolvimento de técnicas de processamento de dados e simulações aplicado ao estudo de meios porosos por Ressonância Magnética Nuclear.</b>                                                                                                                                |    |
| ANDREETA, M. B.; BONAGAMBA, T. J. ....                                                                                                                                                                                                                                                | 55 |



|                                                                                                                                                                                                                        |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>PG9 - Effect of the latitude on the measurement of the UHECR spectrum</b><br>ANJOS, R. A.; SOUZA, V.....                                                                                                            | 56 |
| <b>PG10 - Prospecção de linhagens bacterianas produtoras de surfactantes em reservatórios de petróleo</b><br>ARGENTIN, M. N.; BOSSOLAN, N. R. S. ....                                                                  | 58 |
| <b>PG11 - New zero-field NMR and NQR experiments for studying materials and quantum information processing</b><br>ASCONA, C. R.; BONAGAMBA, T. J.....                                                                  | 60 |
| <b>PG12 - Estudo da entropia como metodologia para o reconhecimento de padrões em texturas</b><br>ASSIRATI, L.; BRUNO, O. M. ....                                                                                      | 62 |
| <b>PG13 - Deformações do modelo de Bullough-Dodd</b><br>AURICHIO, V. H.; FERREIRA, L. A.....                                                                                                                           | 63 |
| <b>PG14 - Caracterização molecular e estrutural do Leishmania RNA Virus LRV1-4</b><br>AZEVEDO, E. C.; SOUZA, M. M.; PORTUGAL, R. V.; THIEMANN, O. H. ....                                                              | 64 |
| <b>PG15 - Fabricação de micro-ambientes para a investigação de crescimento celular utilizando polimerização via absorção de dois fótons</b><br>ÁVILA, O. I.; MENDONÇA, C. R.....                                       | 66 |
| <b>PG16 - Análise de redes complexas por meio do passeios aleatórios</b><br>BAGNATO, G. G.; TRAVIESO, G.....                                                                                                           | 67 |
| <b>PG17 - Develop of an optical imaging system for Bose-Einstein Condensate tomography</b><br>BAHRAMI, A.; HENN, E. A. L. ....                                                                                         | 69 |
| <b>PG18 - Polymeric nanofibers for nanomedicine applications.</b><br>BALLESTEROS, C. A. S.; CORREA, D. S.; ZUCOLOTTI, V. ....                                                                                          | 71 |
| <b>PG19 - Contribution of self-focusing and Fresnel reflection effects in the third-harmonic generation at interfaces</b><br>BARBANO, E. C.; MENDONÇA, C. R.; ZÍLIO, S. C.; MISOGUTI, L.....                           | 72 |
| <b>PG20 - Photoluminescence of radial periodic and doped heterostructured GaAs/AlGaAs nanowires</b><br>BARBOSA, B. G.; PUSEP, Y. A. ....                                                                               | 73 |
| <b>PG21 - Cultivo e isolamento de bactérias anaeróbias termofílicas de reservatório de petróleo, com interesse para espécies da ordem Thermotogales.</b><br>BARDIVIESSO, L. G.; MARTINS, J. M.; BOSSOLAN, N. R. S..... | 74 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>PG22 - Bosonic Josephson Junction and Self-Trapping: A Variational Treatment</b><br>BARRETO, D. L.; dos SANTOS, F. E. A; BAGNATO, V. S.; MAREGA JUNIOR, E. ....                                                                                                                                                   | 76 |
| <b>PG23 - The conformational flexibility of an internal fusion peptide from SARS-CoV spike glycoprotein is modulated by lipid membrane composition</b><br>BASSO, L. G. M.; FERNANDES, T. V. A.; LIMA, J. F.; MUNTE, C. E.; CRUSCA JÚNIOR, E.; VICENTE, E. F.; CILLI, E. M.; PASCUTTI, P. G.; COSTA FILHO, A. J. .... | 77 |
| <b>PG24 - k.p parameters for wurtzite nitrides from ab initio calculations</b><br>BASTOS, C. M. O.; FARIA JUNIOR, P. E.; CAMPOS, T.; SIPAHI, G. M. ....                                                                                                                                                              | 79 |
| <b>PG25 - Biochemical and structural investigation of Naegleria gruberi selenophosphate sintetase enzyme.</b><br>BELLINI, N. K.; SILVA, I. R.; SILVA, M. T. A. da; THIEMANN, O. H. ....                                                                                                                              | 80 |
| <b>PG26 - Engenharia de reservatórios térmicos na teoria do laser</b><br>BERGOC, I.; MORAES NETO, G. D.; MOUSSA, M. H. Y. ....                                                                                                                                                                                       | 82 |
| <b>PG27 - Information on crystalline of sugarcane biomass submitted to a specific pretreatment via solid-state NMR</b><br>BERNARDINELLI, O. D.; LIMA, M. A.; POLIKARPOV, I.; AZEVEDO, E. R. ....                                                                                                                     | 83 |
| <b>PG28 - Desenvolvimento de processos de litografia eletrônica e por feixe de ions para aplicação em nanoplasmonica</b><br>BRATIFICH, R.; MAREGA JUNIOR, E. ....                                                                                                                                                    | 85 |
| <b>PG29 - Desenvolvimento de um sistema unilateral de RMN para aplicação em meios porosos</b><br>BRAZ, D. C.; VIDOTO, E. L. G.; AMORIM, A. D. F.; BONAGAMBA, T. J. ....                                                                                                                                              | 86 |
| <b>PG30 - Nanostructured biosensors for the detection of Adiponectin hormone and studies of its correlation with Diabetes Mellitus type 2</b><br>BRAZACA, L. C.; ZUCOLOTTO, V. ....                                                                                                                                  | 88 |
| <b>PG31 - Novos candidatos a agroquímicos para a cultura da cana-de-açúcar: Descoberta e Planejamento de Inibidores da Biossíntese de Folatos</b><br>BUENO, R. V.; MALUF, F. V.; GUIDO, R. V. C. ....                                                                                                                | 89 |
| <b>PG32 - Avaliação dos efeitos da terapia fotodinâmica usando o modelo tumoral em membrana corioalantóica com células de melanoma e Ehrlich</b><br>BUZZA, H. H.; SILVA, L. V.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. ....                                                                                                     | 91 |
| <b>PG33 - An asymmetric transition between symmetric states: the glucosamine 6-phosphate deaminase allostery</b><br>CAMARA, A. S.; REBOREDO, E. H. ....                                                                                                                                                              | 93 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG34 - Numerical simulations of nanowires under magnetic fields</b><br>CAMPO, T.; FARIA JUNIOR, P. E.; SIPAHI, G. M. ....                                                                                                                                                                                            | 95  |
| <b>PG35 - Combinação de duas modalidades terapêuticas na pele fotoenvelhecida: terapia fotodinâmica e LEDterapia</b><br>CAMPOS, C. P.; JORGE, A. E.; KURACHI, C. ....                                                                                                                                                   | 96  |
| <b>PG36 - D'yakonov-Perel' spin relaxation in quantum wells with intersubband spin-orbit interaction</b><br>CANDIDO, D. R.; PENTEADO, P. H.; EGUES, J. C. ....                                                                                                                                                          | 98  |
| <b>PG37 - Polaron in ultra-cold atoms</b><br>CARACANHAS, M.A.; BAGNATO, V.S.; PEREIRA, R.G; ....                                                                                                                                                                                                                        | 99  |
| <b>PG38 - Construction of a global map of protein-protein interactions in c-di-GMP signalling pathways of Pseudomonas aeruginosa</b><br>CARDOSO, A. R.; NAVARRO, M. V. A. S. ....                                                                                                                                       | 100 |
| <b>PG39 - Características locais no tráfego de pacotes em redes complexas próximo ao ponto de congestionamento</b><br>CARUSO, J. S.; TRAVIESO, G. ....                                                                                                                                                                  | 102 |
| <b>PG40 - Estudo do modelo estocástico PARPM</b><br>CARVAJAL JARA, D. A.; ALCARAZ, F. C. ....                                                                                                                                                                                                                           | 103 |
| <b>PG41 - Development and solid state characterization of a new paroxetine modification</b><br>CARVALHO JR, P. S.; ELLENA, J. ....                                                                                                                                                                                      | 105 |
| <b>PG42 - Desenvolvimento de nanopartículas superparamagnéticas e Core-Shell para aplicações em nanomedicina</b><br>CARVALHO, C. M.; ZUCOLOTTI, V. ....                                                                                                                                                                 | 106 |
| <b>PG43 - Utilização de técnicas fotônicas para avaliação da qualidade da matéria orgânica do solo sob plantação de cana-de-açúcar com diferentes manejos e tratamentos culturais</b><br>CARVALHO, C. M.; MILORI, D. M. B. P.; SANTOS, C. H.; LA SCALA JUNIOR, N.; FIGUEIREDO, E. B.; CORA, J. E.; MARTIN NETO, L. .... | 108 |
| <b>PG44 - Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida</b><br>CASTRO, L. A. de; NAPOLITANO, R. de J. ....                                                                                                                                                                                                     | 110 |
| <b>PG45 - Septin 4: complexes and interactions</b><br>CAVALCANTE, N.; GARRATT, R. C. ....                                                                                                                                                                                                                               | 111 |

|                                                                                                                                                                                                                                                   |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG46 - Expression and purification of (1-40) and (1-42) Alzheimer beta-amyloid peptides</b><br>CAVINI, Í. A.; KALBITZER, H. R.; MUNTE, C. E. ....                                                                                              | 112 |
| <b>PG47 - Propriedades termodinâmicas de nanoclusters com parallel tempering Monte Carlo</b><br>CEZAR, H. M.; RONDINA, G. G.; SILVA, J. L. F. ....                                                                                                | 114 |
| <b>PG48 - A first-principles investigation of the atomic and electronic structure of Ptn, Cun and (PtCu)n (n = 2 - 14) clusters</b><br>CHAVES, A. S.; RONDINA, G. G.; PIOTROWSKI, M. J.; SILVA, J. L. F. da .....                                 | 115 |
| <b>PG49 - Dispositivos supercondutores e simulações quânticas</b><br>CHERUBIM, C. F.; BRITO, F. B. ....                                                                                                                                           | 117 |
| <b>PG50 - Septina de Chlamydomonas reinhardtii: estudos com foco em sua expressão e função</b><br>CIOL, H.; AVACA-CRUSCA, J. S.; ARAUJO, A. P. U. ....                                                                                            | 118 |
| <b>PG51 - A new analytical approximation based on 2 Gaussians for describing NMR signals in dipolar-coupling based experiments</b><br>COBO, M. F.; AZEVÊDO, E. R.; REICHERT, D.; SAALWAECHTER, K. ....                                            | 120 |
| <b>PG52 - Síntese e caracterização de perovskitas <math>Sr_{1-x}Cu_xTiO_3</math> e <math>SrTi_{1-x}Cu_xO_3</math> para catálise da reação de deslocamento água-gás</b><br>COLETTA, V. C.; BERNARDI, M. I. B.; ASSAF, E. M.; MASTELARO, V. R. .... | 122 |
| <b>PG53 - Statistical analysis of the aging process in the fornix area of the rhesus monkeys brain</b><br>COMIN, C. H.; COSTA, L. F. ....                                                                                                         | 124 |
| <b>PG54 - Desenvolvimento de um genossensor de baixo custo e resposta rápida</b><br>CORRER, W.; ZUCOLOTTI, V. ....                                                                                                                                | 125 |
| <b>PG55 - Electrical properties of P3HT:PCBM thin films used as active layers in organic photovoltaics</b><br>COUTINHO, D. J.; FARIA, R. M. ....                                                                                                  | 126 |
| <b>PG56 - Spintrônica</b><br>CRUZ, A. R.; MENEZES, J. C. E. ....                                                                                                                                                                                  | 127 |
| <b>PG57 - Análise termodinâmico de um gás ultrafrio em uma armadilha híbrida</b><br>CUEVAS, F. J. P.; CASTILHO, P.; FRITSCH, A.; MUNIZ, S.; BAGNATO, V. S. ....                                                                                   | 128 |
| <b>PG58 - Caracterização estrutural e funcional das proteínas TORC de Trypanosoma cruzi</b><br>DE GROOTE, M. C.; REBOREDO, E. H. ....                                                                                                             | 129 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG59 - Mirror characterizing for Cherenkov telescopes</b><br>DIPOLD, J.; SOUZA, V. ....                                                                                                                                                                                                                 | 130 |
| <b>PG60 - Refratômetro por reflexão total interna</b><br>DOMENEGUETI, J. F. M.; ZILIO, S. C. ....                                                                                                                                                                                                          | 132 |
| <b>PG61 - Biochemical and biophysical studies of specific proteins recruited for SL trans splicing in Trypanosoma brucei</b><br>E SILVA, I. R.; DA SILVA, M. T. A.; BORALII, C. M. S.; SOUZA, G. E.; THIEMANN, O. H. ....                                                                                  | 133 |
| <b>PG62 - Ozone gas sensor based on <math>La_xSr_{1-x}Ti_yFe_{1-y}O_3</math> thin films</b><br>ESCANHOELA JUNIOR, C. A.; SILVA, L. F.; BERNARDI, M. I. B.; MASTELARO, V. R. ....                                                                                                                           | 135 |
| <b>PG63 - Transformada wavelet aplicada na extração das características do ruído emitido pela caneta ao assinar</b><br>ESCOLA, J. P. L.; GUIDO, R. C. ....                                                                                                                                                 | 136 |
| <b>PG64 - The influence of the organosolv and hydrothermal pretreatment in bagasse sugarcane on the increases significantly ethanol production</b><br>ESPIRITO SANTO, M. C.; NOGUEIRA, A. R. S.; LIMA, M. A.; MORIM, M. A. S.; SELEGHIM JUNIOR, P.; CURVELO, A. A. S.; POLIKARPOV, I.; AZEVEDO, E. R. .... | 137 |
| <b>PG65 - Expression, purification, crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of the Pectinases from the sugar cane weevil, Sphenophorus levis.</b><br>EVANGELISTA, D. E.; GODOY, A. S. de.....                                                                                           | 138 |
| <b>PG66 - Caracterização molecular e estrutural das selenoproteínas de Trypanosoma brucei</b><br>EVANGELISTA, J. P.; MORAES, I.; THIEMANN, O. H. ....                                                                                                                                                      | 140 |
| <b>PG67 - Propriedades naturais das estruturas sociais: aspectos topológicos e linguísticos</b><br>FABBRI, R.; COSTA, L. F.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ....                                                                                                                                                   | 141 |
| <b>PG68 - Optical generation of spin imbalance in Si nanowires</b><br>FARIA JUNIOR, P. E.; SIPAHI, G. M.; ZUTIC, I. ....                                                                                                                                                                                   | 142 |
| <b>PG69 - Nanostructured biosensors for the early dengue diagnosis</b><br>FARIA, H. A. M.; ZUCOLOTTI, V.....                                                                                                                                                                                               | 143 |
| <b>PG70 - Observation of classical bifurcation in a quadrupolar NMR system</b><br>FERREIRA, A. G. A.; ESTRADA, R. A.; SARTHOUR JUNIOR, R. S.; OLIVEIRA JUNIOR, I. S.; RODITI, I.; BONAGAMBA, T. J.....                                                                                                     | 144 |
| <b>PG71 - Imunossensores potenciométricos para a detecção de doenças negligenciadas</b><br>FIGUEIREDO, A.; SANTOS, J. F.; VIEIRA, N. C. S.; ZUCOLOTTI, V.; GUIMARÃES, F. E. G....                                                                                                                          | 146 |

|                                                                                                                                                                                                                                 |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG72 - TiO<sub>2</sub> assisted rhodamine B photodegradation via multiphotonic excitation</b><br>FIGUEREDO, T. R.; VIVAS, M. G.; MENDONÇA, C. R.....                                                                         | 148 |
| <b>PG73 - Estudos de modelagem molecular de candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas</b><br>FIORAVANTI, C. M.; ANDRICOPULO, A. D.; GUIDO, R. V. C. ....                                                      | 149 |
| <b>PG74 - Nonlinear index of refraction of borate glass doped with transition metals</b><br>FONSECA, R. D.; ALMEIDA, J. M.; DE BONI, L.; HERNANDES, A. C.; MENDONÇA, C. R.....                                                  | 150 |
| <b>PG75 - A first-principles investigation of the adsorption mechanisms of TM (Rh, Pd, Ir, Pt) on Cu(111) and Au(111) surfaces</b><br>FREIRE, R. L. H.; KIEJNA, A.; SILVA, J. L. F.....                                         | 151 |
| <b>PG76 - Interação da luz com uma nuvem ultrafria de átomos de rubídio</b><br>FRITSCH, A. R.; CUEVAS, F. J. P.; MUNIZ, S. R.; BAGNATO, V. S.....                                                                               | 153 |
| <b>PG77 - The mechanisms behind the enhancement of the near-infrared light emission due to Er<sup>3+</sup>/Yb<sup>3+</sup> ions in an optical microcavity</b><br>GALLO, I. B.; ZANATTA, A. R.; BRAUD, A.; MONCORGÉ, R.....      | 154 |
| <b>PG78 - Entanglement entropy in one-dimensional spin chain system under quenched disorder</b><br>GELETINA, J. C. A.; ALCARAZ, F. C.; HOYOS, J. A.....                                                                         | 155 |
| <b>PG79 - Structural studies of three beta-galactosidases from <i>Xanthomonas campestris</i></b><br>GODOY, A. S. de; CAMILLO, C. M.; POLIKARPOV, I.....                                                                         | 156 |
| <b>PG80 - Development of a system for imaging Rydberg atoms in a CO<sub>2</sub> dipole trap and in an optical lattice</b><br>GONÇALVES, L. F.; KONDO, J. D. M.; MARCASSA, L. G. ....                                            | 157 |
| <b>PG81 - Rastreamento de linfonodo sentinela através de técnicas de fluorescência óptica com o uso de indocianina verde.</b><br>GOVONE, A. B.; KURACHI, C.....                                                                 | 158 |
| <b>PG82 - Desenvolvimento de um aparato de instrumentação para estudos de eletrocomunicação em peixes elétricos de campo fraco</b><br>GUARIENTO, R. T.; ALMEIDA, L. O. B.; BARROS, K. L. P.; GONÇALVES, M. R.; PINTO, R. D..... | 160 |
| <b>PG83 - Estudos estruturais e funcionais da proteína CrNIP7 de <i>Chlamydomonas reinhardtii</i></b><br>GUTIERREZ, R. F.; CRUSCA, J. S. A.; ARAUJO, A. P. U. ....                                                              | 161 |

|                                                                                                                                  |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG84 - Influence of two transposable elements in the genome architecture of <i>Schistosoma mansoni</i></b>                    |     |
| JACINTO, D. S.; DE MARCO, R. ....                                                                                                | 163 |
| <b>PG85 - Laser sintering reduces dielectric loss in <math>\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}</math> ceramics.</b>            |     |
| JESUS, L. M.; SILVA, R. S.; M'PEKO, J. C. ....                                                                                   | 164 |
| <b>PG86 - Abordagem de autômatos celulares caóticos híbridos na criptografia</b>                                                 |     |
| JUSTO, M. J. M.; BRUNO, O. M. ....                                                                                               | 165 |
| <b>PG87 - Studying Rydberg interactions in a quasi unidimensional system</b>                                                     |     |
| KONDO, J. D. M.; GONÇALVES, L. F.; MARCASSA, L. G. ....                                                                          | 166 |
| <b>PG88 - Montagem experimental e estudos de gases quânticos heteronucleares (NaK)</b>                                           |     |
| KRUGER, A. L.; PEÑAFIEL, E. E. P.; VIVANCO, F. A. J.; THOMPSON, K. J.; BAGNATO, V. S.; FARIAS, K. M.; MAREGA JUNIOR, E. ....     | 167 |
| <b>PG89 - Photodynamic inactivation of microorganisms related to pulmonary diseases: an in vitro study.</b>                      |     |
| LEITE, I. S.; GERALDE, M. C.; SALINA, A. C. G.; MEDEIROS, A. I.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M. ....                  | 168 |
| <b>PG90 - Estudo estrutural de três beta-glicosidases de <i>Bacillus licheniformis</i></b>                                       |     |
| LIBERATO, M. V.; CAMILO, C. M.; POLIKARPOV, I. ....                                                                              | 170 |
| <b>PG91 - Structural characterization of <i>Trypanosoma brucei</i> spliceosomal protein U5-15K</b>                               |     |
| LIMA, A. L. de; THIEMANN, O. H.; SILVA, M. T. A. da ....                                                                         | 171 |
| <b>PG92 - Finite temperature quantum field theory and the Unruh effect</b>                                                       |     |
| LIMA, C. A. U.; VANZELLA, D. A. T. ....                                                                                          | 173 |
| <b>PG93 - Descoberta e planejamento de novos agroquímicos para a cultura da cana-de-açúcar</b>                                   |     |
| LIMA, G. M. A.; GUIDO, R. V. C. ....                                                                                             | 174 |
| <b>PG94 - Estudos funcionais e estruturais de enzimas frutotransferases das famílias 32 e 68 de hidrolases de glicosídeos</b>    |     |
| LIMA, M. Z. T.; POLIKARPOV, I.; MUNIZ, J. R. C. ....                                                                             | 176 |
| <b>PG95 - Caracterização do emaranhamento em estados mistos via informação de Fisher</b>                                         |     |
| LIMA, R. B. B.; PIRES, D. P.; MOUSSA, M. H. Y.; SOARES-PINTO, D. O. ....                                                         | 178 |
| <b>PG96 - Estudos de modelagem molecular de novos candidatos a moduladores da proteína tubulina para o tratamento do câncer.</b> |     |
| MAGALHÃES, L. G.; ANDRICOPULO, A. D. ....                                                                                        | 179 |

**PG97 - Estudos estruturais da enzima enolase de *P. falciparum***

MALUF, F. V.; SANTOS, E. A.; SILVA, C. R.; OLIVA, G.; GUIDO, R. V. C. .... 180

**PG98 - Nanomateriais teranósticos aplicados à problemática do câncer e estudos de nanotoxicidade**

MARANGONI, V. S.; ZUCOLOTTI, V. .... 182

**PG99 - Aplicação da imagem por ressonância magnética para identificação de injúrias mecânicas e tecidos deteriorados em sementes**

MARASSI, A. G.; TANNUS, A.; GOMES JUNIOR, F. G. .... 183

**PG100 - Estudo da possibilidade de detecção de matéria escura com telescópios Cherenkov**

MARCOMINI, J.; SOUZA, V. .... 185

**PG101 - Enhancement of ZnO exciton band via pulse shaping**

MARTINS, R. J.; SIQUEIRA, J. P.; MISOGUTI, L.; VOSS, T.; MENDONÇA, C. R. .... 186

**PG102 - Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco *Gymnotus carapo***

MATIAS, P.; SLAETS, J. F. W. .... 188

**PG103 - Modelagem molecular no desenvolvimento de modelos para estudos da permeabilidade em células caco-2**

MATOS, K. S.; MODA, T. L.; ANDRICOPULO, A. D. .... 189

**PG104 - Structural and functional characterization of FleQ from *Pseudomonas aeruginosa* and *Xanthomonas citri*: a transcriptional factor involved in flagellar gene expression and biofilm formation**

MATSUYAMA, B. Y.; NAVARRO, M. V. A. S. .... 191

**PG105 - O efeito Farol**

MAXIMO, C. E.; BACHELARD, R.; COURTEILLE, Ph. W. .... 193

**PG106 - Identification of Fe/MnSODs structural determinants necessary to metal specificity**

MENDOZA, E.; STELMASTCHUK, L. B. F.; FERREIRA JÚNIOR, J. R.; GARRATT, R. C. .... 194

**PG107 - Engenharia de interações seletivas e preparação de estados de Fock via reservatório atômico**

MERCADO, W. R.; MOUSSA, M. H.Y. .... 195

**PG108 - Comparação genotípica e fenotípica de *Enterococcus faecalis* resistentes à vancomicina isolados nos anos de 2009 e 2011 em um hospital de Minas Gerais**

MERLO, T. P.; MARCELLO JUNIOR, H. B.; CAMARGO, I. L. B. C. .... 196



|                                                                                                                                                                                                                                           |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG109 - Quebra espontânea de simetria: estudo teórico e computacional</b><br>MIGLORIA, A.; MENDES, T. C. R. ....                                                                                                                       | 198 |
| <b>PG110 - Técnicas de resfriamento e aprisionamento de átomos aplicadas a átomos de estrôncio</b><br>MIGUEZ, M. L.; COURTEILLE, P. W. ....                                                                                               | 199 |
| <b>PG111 - Interação de compostos com atividade sobre a enzima cruzaína em monocamadas de Langmuir como modelo de membrana celular</b><br>MONTANHA, E. A.; ANDRICOPULO, A. D.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ....                                | 200 |
| <b>PG112 - Estudo da difusão de troca entre poros utilizando técnicas 1D e 2D de RMN</b><br>MONTRAZI, E. T.; SOUZA, A. A.; D'EURIDYCE, M. N.; SILVA, R. O.; POLLI, R. S.; FORTULAN, C. A.; BONAGAMBA, T. J. ....                          | 201 |
| <b>PG113 - Desenvolvimento de técnicas de precessão livre no estado estacionário (SSFP) com alternância de fase para aquisição rápida de espectros de RMN em alta resolução</b><br>MORAES, T. B.; COLNAGO, LUIZ A. ....                   | 203 |
| <b>PG114 - Human septins SEPT5-SEPT7-SEPT8 interact in a hetero-complex</b><br>MORAIS, S. T. B.; MACEDO, J. N. A.; CRUSCA, E.; LOPES, J. L. S.; ARAUJO, A. P. U. ....                                                                     | 205 |
| <b>PG115 - Avaliação do transporte intracelular de isoformas da pulchellina utilizando microscopia confocal</b><br>MOREIRA, H. H. T.; CRUSCA, J. S. A.; ARAUJO, A. P. U. ....                                                             | 206 |
| <b>PG116 - Radiação em uma nuvem de estrôncio</b><br>MORIYA, P. H.; COURTEILLE, Ph. W. ....                                                                                                                                               | 208 |
| <b>PG117 - A basic mechanism for contrast normalization</b><br>MOSQUEIRO, T. S.; MAIA, L. P. ....                                                                                                                                         | 209 |
| <b>PG118 - Evaluation of a hybrid docking approach for ligand-receptor interactions.</b><br>MUNIZ, H. dos S.; NASCIMENTO, A. S. ....                                                                                                      | 210 |
| <b>PG119 - Férmions de Majorana em isolantes magnéticos</b><br>NATORI, W. M. H.; PEREIRA, R. G. ....                                                                                                                                      | 211 |
| <b>PG120 - Microscopia por geração de soma de frequências</b><br>OITICICA, P. R. A.; MIRANDA, P. B. ....                                                                                                                                  | 213 |
| <b>PG121 - Hybrid organic-inorganic photochromic xerogels studied by solid state nuclear magnetic resonance and electronic paramagnetic resonance</b><br>OLIVEIRA JUNIOR, M.; SCHNEIDER, J. F.; RODRIGUES FILHO, U. P.; MAGON, C. J. .... | 214 |

|                                                                                                                                                                   |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG122 - Modelagem molecular da enzima AOX de m. pernicioso: alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de novos agroquímicos para a vassoura-de-bruxa.</b> |     |
| OLIVEIRA, A. A.; GUIDO, R. V. C.; LIMA, G. M. A. ....                                                                                                             | 216 |
| <b>PG123 - Desenvolvimento de técnica de alinhamento óptico de um telescópio TMA</b>                                                                              |     |
| OLIVEIRA, A. O.; SCADUTO, L. C. N.; CASTRO NETO, J. C. ....                                                                                                       | 218 |
| <b>PG124 - Refratômetro diferencial para medida simultânea de Brix e sacarose</b>                                                                                 |     |
| OLIVEIRA, A. R.; DOMENEGUETI, J. F. M.; ZÍLIO, S. C. ....                                                                                                         | 220 |
| <b>PG125 - Relaxação transversal em meios porosos: métodos de RMN e simulação computacional</b>                                                                   |     |
| OLIVEIRA, E. L.; OLIVEIRA-SILVA, R.; MONTRAZI, E. T.; VIDOTO, E. L. G.; BONAGAMBA, T. J.; SOARES-PINTO, D. O. ....                                                | 221 |
| <b>PG126 - Estudo sobre a adiabaticidade em ressonância magnética nuclear</b>                                                                                     |     |
| ONCEBAY SEGURA, C.; SOARES-PINTO, D. O. ....                                                                                                                      | 223 |
| <b>PG127 - The interaction between human protein S100A9 and the parasite Schistosoma mansoni s protein MEG-14</b>                                                 |     |
| ORCIA, D.; DeMARCO, R.; MACEDO, J. N. A. ....                                                                                                                     | 224 |
| <b>PG128 - Implementação de metodologias de imagens por ressonância magnética para medidas não invasivas de perfusão sanguínea cerebral</b>                       |     |
| PASCHOAL, A. M.; PAIVA, F. F. ....                                                                                                                                | 225 |
| <b>PG129 - Estudos estruturais e funcionais de novos ligantes sintéticos do receptor PPAR gama</b>                                                                |     |
| PAULA, K.; MAFUD, A. C.; NASCIMENTO, A. S. ....                                                                                                                   | 227 |
| <b>PG130 - Planejamento, síntese e avaliação biológica de novos inibidores da enzima cruzaina de Trypanosoma cruzi</b>                                            |     |
| PAULI, I.; FERREIRA, R. S.; DESSOY, M. A.; SOUZA, M. L. de; SALES, A. I. L.; KROGH, R.; DUARTE, S. M.; DIAS, L. C.; OLIVA, G.; ANDRICOPULO, A. D. ....            | 228 |
| <b>PG131 - Production and investigation in a two-component BEC</b>                                                                                                |     |
| PEDROZO-PEÑAFIEL, E; PAIVA, R. R; VIVANCO, F. J; KRUGER, A; CASTILHO, P; THOMPSON, K. J; Farias, K. M; BAGNATO, V. S. ....                                        | 230 |
| <b>PG132 - Caracterização de estado sólido do fumarato de dietilcarbamazina</b>                                                                                   |     |
| PEPINO, R. O.; SILVA, C. C. P.; ELLENA, J. ....                                                                                                                   | 231 |
| <b>PG133 - Synchronization in random clustered networks</b>                                                                                                       |     |
| PERON, T. K. D. M.; RODRIGUES, F. A.; KURTHS, J. ....                                                                                                             | 232 |

|                                                                                                                                                                                                                                                       |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG134 - Estudo da distribuição de elementos transponíveis nos íntrons ortólogos das espécies <i>Chlamydomonas reinhardtii</i> e <i>Volvox carteri</i></b><br>PHILIPSEN, G. S.; DE MARCO, R. ....                                                   | 233 |
| <b>PG135 - Informação de Fisher como quantificador em mecânica quântica</b><br>PIRES, D. P.; PINTO, D. O. S.; MOUSSA, M. H. Y. ....                                                                                                                   | 234 |
| <b>PG136 - Terapia fotodinâmica para o tratamento do melanoma</b><br>PIRES, L.; MORIYAMA, L. T.; GRECCO, C.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C. ....                                                                                                        | 236 |
| <b>PG137 - Desenvolvimento de API e IDE para Ressonância Magnética</b><br>PIZETTA, D. C.; SILVA, D. M. D. D. da; LOURENÇO, G. V.; FREIRE, G.; COELHO, F. B.; MARTINS, M. J.; VIDOTO, E. G.; TANNUS, A. ....                                           | 238 |
| <b>PG138 - Utilização de técnicas de Imagens por ressonância magnética para o estudo de meios porosos</b><br>POLLI, R. S.; OLIVEIRA-SILVA, R.; SOUZA, A. A.; VIDOTO, E. L. G.; AMORIM, A. D. F.; BONAGAMBA, T. J. ....                                | 240 |
| <b>PG139 - Composition of ultra high energy cosmic rays</b><br>PRADO, R. R.; SOUZA, V. ....                                                                                                                                                           | 242 |
| <b>PG140 - Microscopia óptica não-linear para imagens de sistemas biológicos</b><br>PRATAVIEIRA, S.; GRECCO, C.; PIRES, L.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. ....                                                                                          | 244 |
| <b>PG141 - Processamento digital de sinais de ressonância magnética nuclear</b><br>QUEIROZ, G. E. T.; GUIDO, R. C. ....                                                                                                                               | 245 |
| <b>PG142 - Estudos estruturais e funcionais de uma endoglucanase pertencente a família das glicosil-hidrolases 45</b><br>GODOY, A.; CAMILO, C. M.; POLIKARPOV, I.; RAMIA, M. ....                                                                     | 247 |
| <b>PG143 - Avaliação da técnica de espectroscopia de plasma induzido por laser no diagnóstico de doenças em citrus: Greening</b><br>RANULFI, A. C.; SILVA da, J. T. B.; RABELLO, G. C.; SILVA da, D. C.; VILLAS BOAS, P. R.; MILORI, D. M. B. P. .... | 248 |
| <b>PG144 - Properties of <math>Pt_n</math> <math>n = 1 - 6</math> on Graphene</b><br>REGO, C. R. C.; TERESHCHUK, P.; OLIVEIRA, L. N.; DA SILVA, J. L. F. ....                                                                                         | 250 |
| <b>PG145 - Aplicação da luz intensa pulsada em terapia fotodinâmica</b><br>REQUENA, M. B.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; MENEZES, P. F. C. ....                                                                                                        | 252 |
| <b>PG146 - Fabrication of thin films using gold nanorods and polyamidoamine dendrimers</b><br>RIBOVSKI, L.; MARANGONI, V. S.; SANTOS, F. A.; JANEGITZ, B. C.; ZUCOLOTTI, V. ....                                                                      | 254 |

|                                                                                                                                                                                        |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG147 - Unveiling the bactericidal molecular mechanism of conjugated cationic polyelectrolyte on a biomimetic membrane (Langmuir Film) by sum-frequency generation spectroscopy</b> |     |
| RIMOLI, C. V.; WHITTEN, D.; MIRANDA, P. B. ....                                                                                                                                        | 255 |
| <b>PG148 - Compósitos laminados e nanocompósitos magnetoelétricos</b>                                                                                                                  |     |
| RODRIGUES, J. E. F.; HERNANDES, A. C. ....                                                                                                                                             | 257 |
| <b>PG149 - Structural studies of the old yellow enzyme from <i>Trypanosoma cruzi</i></b>                                                                                               |     |
| RODRIGUES, N. C.; MURAKAMI, M. T.; HONORATO, R. V.; GAVA, L. M.; CANDURI, F.; BARBOSA, L. R. S.; OLIVA, G.; BORGES, J. C. ....                                                         | 258 |
| <b>PG150 - Microfuros na otimização da terapia fotodinâmica: uma comparação entre laser Er:YAG e microfuros mecânicos.</b>                                                             |     |
| RODRIGUES, P. G. S.; MENEZES, P. F.C.; FUJITA, A. K. L.; JORGE, A. E. S.; ANGARITA, D. P. R.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S. ....                                                         | 260 |
| <b>PG151 - Referência atômica de tempo e frequência em um chafariz de átomos frios-segunda geração</b>                                                                                 |     |
| RODRIGUEZ, S. A; MAGALHAES, D. V. ....                                                                                                                                                 | 262 |
| <b>PG152 - Estudos estruturais e moleculares das enzimas PtpA e PtpB como alvos moleculares para o tratamento da tuberculose.</b>                                                      |     |
| RODRIGUEZ, V. K. T.; GUIDO, R. V. C. ....                                                                                                                                              | 263 |
| <b>PG153 - Crystal structure of <i>Schistosoma mansoni</i> adenylosuccinate lyase in complex with AMP</b>                                                                              |     |
| ROMANELLO, L.; TORINI, J.; BIRD, L.; NETTLESHIP, J.; OWENS, R.; REDDIVARI, Y.; BRANDÃO NETO, J.; PEREIRA, H. D. M. ....                                                                | 264 |
| <b>PG154 - A revised basin-hopping Monte Carlo method applied to the global optimization of nanoparticles</b>                                                                          |     |
| RONDINA, G. G.; SILVA, J. L. F. ....                                                                                                                                                   | 265 |
| <b>PG155 - Correlações entre medidas de centralidade: comportamento, efetividade e diferenciação de redes complexas</b>                                                                |     |
| RONQUI, J. R. F.; TRAVIESO, G. ....                                                                                                                                                    | 267 |
| <b>PG156 - Structural and functional studies of c-di-GMP transmembrane receptors involved in virulence and bacterial biofilm formation</b>                                             |     |
| ROSSETO, F. R.; NAVARRO, M. V. A. S. ....                                                                                                                                              | 268 |
| <b>PG157 - Simulação de efeitos quânticos relativísticos em armadilhas iônicas.</b>                                                                                                    |     |
| ROSSETTI, R. F.; MOUSSA, M. H. Y. ....                                                                                                                                                 | 270 |

|                                                                                                                                                                                                 |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG158 - The role of the <i>sp-d</i> hybridization in the crystal structure of transparent conducting oxides: The example of the <math>A_2O_3</math> (<math>A = Al, Ga, In</math>) oxides</b> |     |
| SABINO, F. P.; OLIVEIRA, L. N.; SILVA, J. L. F.....                                                                                                                                             | 271 |
| <b>PG159 - Study of the threshold dose distribution using three dimensional cell cultures based on magnetic levitation</b>                                                                      |     |
| SABINO, L. G.; KILLIAN, T. C.; SOUZA, G. R.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. ....                                                                                                                   | 273 |
| <b>PG160 - Estudos de cristalização do ElrR</b>                                                                                                                                                 |     |
| SALCEDO, D. L. P.; REBOREDO, E. H. ....                                                                                                                                                         | 275 |
| <b>PG161 - Electron spin resonance of antiferromagnetic systems: multiferroics, conducting polymers and ludwigites.</b>                                                                         |     |
| SANTANA, V. T.; WALMSLEY, L.; NASCIMENTO, O. R. ....                                                                                                                                            | 276 |
| <b>PG162 - Multicharged vortices stability in Bose-Einstein condensates</b>                                                                                                                     |     |
| SANTOS, A. C.; BAGNATO, V. S.; HOYOS NETO, J. A. ....                                                                                                                                           | 277 |
| <b>PG163 - Reduced graphene oxide films for application in estradiol detection</b>                                                                                                              |     |
| SANTOS, F. A.; JANEGITZ, B. C.; ZUCOLOTTI, V. ....                                                                                                                                              | 278 |
| <b>PG164 - Epidemiologia molecular de Enterobacteriaceae produtoras de KPC isoladas na região de São Carlos</b>                                                                                 |     |
| SANTOS, J.; CAMARGO, I. L. B. C. ....                                                                                                                                                           | 279 |
| <b>PG165 - Structural basis for GL479 a dual peroxisome proliferator-activated receptor<math>\alpha/\gamma</math> agonist</b>                                                                   |     |
| SANTOS, J. C.; AMOROSO, R.; POLIKARPOV, I. ....                                                                                                                                                 | 280 |
| <b>PG166 - Estudo da adsorção de monocamadas de água em gesso através de óptica não-linear</b>                                                                                                  |     |
| SANTOS, J. C. C.; MIRANDA, P. B. ....                                                                                                                                                           | 282 |
| <b>PG167 - Utilização da equação de Langevin em RMN aplicada ao estudo de meios porosos</b>                                                                                                     |     |
| SANTOS, M. L.; BONAGAMBA, T. J.; SOARES-PINTO, D. O.; MAIA, L. P. ....                                                                                                                          | 283 |
| <b>PG168 - Purificação da enzima alostérica Glucosamina-6-fosfato de Escherichia coli para experimentos de Ressonância Magnética Nuclear</b>                                                    |     |
| SANTOS, V. A. R. dos; HORJALES, E. ....                                                                                                                                                         | 285 |
| <b>PG169 - Análise da curvatura como fator de discriminação entre lesões melanocíticas</b>                                                                                                      |     |
| SBRISSA, D. A.; BAGNATO, V.; KURACHI, C.; TRAVIESO, G.; COSTA, L.; SALVIO, A. G. ....                                                                                                           | 287 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                      |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG170 - Estudo de sensibilidade ao alinhamento e desenvolvimento de uma metodologia para alinhamento de sistemas ópticos por meio da análise de aberrações de frente de onda utilizando redes neurais artificiais</b><br>SCADUTO, L. C. N.; CASTRO NETO, J. C. ....               | 288 |
| <b>PG171 - SU(2) lattice gluon propagator and potential models</b><br>SERENONE, W. M.; CUCCHIERI, A.; MENDES, T. ....                                                                                                                                                                | 290 |
| <b>PG172 - Caracterização das interações macromoleculares das proteínas envolvidas na síntese de selenocisteínas em Escherichia coli</b><br>SERRÃO, V. H. B.; PORTUGAL, R. V.; HEEL, M. V.; THIEMANN, O. H. ....                                                                     | 292 |
| <b>PG173 - Quantum turbulence in a harmonically trapped Bose-Einstein condensate: from vortices to granulation</b><br>SHIOZAKI, R. F.; TAVARES, P. E. S.; BAHRAMI, A.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S. ....                                                            | 293 |
| <b>PG174 - Protótipo dataflow em FPGA</b><br>SILVA JUNIOR, J. T.; RUGGIERO, C. A. ....                                                                                                                                                                                               | 294 |
| <b>PG175 - Terapia fotodinâmica no tratamento das micoses superficiais</b><br>SILVA, A. P. da; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M. ....                                                                                                                                        | 296 |
| <b>PG176 - 5-fluorocytosine: towards the salt formation</b><br>SILVA, C. C. P.; OLIVEIRA, R.; AYALA, A. P.; HONORATO, S. B.; ELLENA, J. ....                                                                                                                                         | 297 |
| <b>PG177 - KBDM: Um novo método para processamento de sinais de MRS</b><br>SILVA, C. M. P.; TANNUS, A. ....                                                                                                                                                                          | 299 |
| <b>PG178 - Ferramentas multiplataforma para aquisição, organização, processamento e visualização de dados em espectrômetro digital de RM</b><br>SILVA, D. M. D. D.; PIZETTA, D. C.; COELHO, F. B.; LOURENÇO, G. V.; FREIRE, G. M.; MARTINS, M. J.; VIDOTO, E. L. G.; TANNÚS, A. .... | 300 |
| <b>PG179 - Estudos estruturais e bioquímicos sobre os receptores CHASE bacterianos associados a domínios GGDEF/EAL</b><br>SILVA, E. E. D.; NAVARRO, M. V. A. S. ....                                                                                                                 | 302 |
| <b>PG180 - Redes complexas multidimensionais</b><br>SILVA, F. N.; COSTA, L. F. ....                                                                                                                                                                                                  | 304 |
| <b>PG181 - Theory and applications of general quantum correlations in nuclear magnetic resonance systems</b><br>SILVA, I. A.; PINTO, D. O. S.; AZEVEDO, E. R. ....                                                                                                                   | 306 |

|                                                                                                                                                                                                                                                              |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG182 - Electron paramagnetic resonance of monomeric and dimeric copper complexes</b><br>SILVA, I. D. A.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; NASCIMENTO, O. R.; MATTO, S. R. I.;<br>ETCHEVERRY, S. B. ....                                                      | 308 |
| <b>PG183 - Quantum plasmonic interaction: emission enhancement of Er 3+ - Tm 3+<br/>co-doped tellurite glass via tuning nanobowtie</b><br>SILVA, O. B.; RIVERA, V. A. G.; FERRI, F. A.; LEDEMI, Y.; ZANATTA, A. R.; MESSADDEQ,<br>Y.; MAREGA JUNIOR, E. .... | 310 |
| <b>PG184 - Aplicação da Ressonância Magnética Nuclear para o estudo de líquidos em<br/>meios porosos</b><br>SILVA, R. de O.; SOUZA, A. A. de; AMORIM, A. D. F. de; VIDOTO, E. L. G.; BONAGAMBA,<br>T. J. ....                                                | 312 |
| <b>PG185 - Structural determination of TASV-A, a Trypanosoma cruzi protein member of<br/>the TcTASV family.</b><br>SILVA, R. M. A. A.; HORJALES, E.; MUNTE, C. E. ....                                                                                       | 314 |
| <b>PG186 - Estudo dos processos de fotodegradação de politiofenos utilizando Ressonância<br/>Magnética Nuclear.</b><br>SILVA, U. B.; AZEVEDO, E. R.; FERREIRA, G. R. ....                                                                                    | 315 |
| <b>PG187 - Modo dipolar do centro de massa de um condensado aprisionado</b><br>SMAIRA, A. F.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S. ....                                                                                                                         | 317 |
| <b>PG188 - Decoerência e recoerência na dinâmica de estados quânticos: influência da<br/>injeção de ruído estocástico clássico</b><br>SOARES, P. M. S. B.; SOARES-PINTO, D. O. ....                                                                          | 318 |
| <b>PG189 - On the quantization of surface plasmon polaritons</b><br>SOBREIRA, F. W. A.; MAREGA JUNIOR, E.; PEREIRA, R. G. ....                                                                                                                               | 320 |
| <b>PG190 - Modeling with equivalent circuits to explain the influence from polyelectrolytes<br/>in electrolyte-insulator-semiconductor capacitors used in biosensors</b><br>SOUSA, M. A. M.; SIQUEIRA JUNIOR, J. R.; VERCIK, A.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. .... | 321 |
| <b>PG191 - Estudo das propriedades optoeletrônicas das células eletroquímicas emissora<br/>de luz</b><br>SOUSA, W. da S.; FARIA, R. M. ....                                                                                                                  | 323 |
| <b>PG192 - Estudos da diversidade química e biológica de moduladores e alvos moleculares<br/>para a terapia da doença de Chagas</b><br>SOUZA, A. S.; ANDRICOPULO, A. D. ....                                                                                 | 324 |

|                                                                                                                                                                                            |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG193 - Identificação de novos inibidores da enzima cruzaina de Trypanosoma cruzi candidatos a fármacos na terapia da doença de Chagas</b>                                              |     |
| SOUZA, M. L.; ANDRICOPULO, A. D.....                                                                                                                                                       | 325 |
| <b>PG194 - Supercontinuum pulse train fluorescence technique: triplet state dynamics determination</b>                                                                                     |     |
| SOUZA, T. G. B.; DE BONI, L. ....                                                                                                                                                          | 327 |
| <b>PG195 - Identification of Mn/FeSODs structural determinants necessary to metal specificity</b>                                                                                          |     |
| STELMASTCHUK, L. B. F.; CHAMBERGO, F. S.; FERREIRA JÚNIOR, J. R.; GARRATT, R. C...                                                                                                         | 329 |
| <b>PG196 - Desenvolvimento de nova técnica de diagnóstico para tumores não profundos a partir de medidas termográficas</b>                                                                 |     |
| STRINGASCI, M. D.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. ....                                                                                                                                        | 330 |
| <b>PG197 - Estudo de excitações randômicas em superfluidos atômicos</b>                                                                                                                    |     |
| TAVARES, P. E. S.; SHIOZAKI, R. F.; BAHRAMI, A.; TONIN, Y. R.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. de L.; BAGNATO, V. S.; FARIAS, K. M.....                                                         | 331 |
| <b>PG198 - Structural studies on Trypanosoma cruzi P21 protein as a strategy for chagas disease treatment</b>                                                                              |     |
| TEIXEIRA, F. B.; CRUSCA, E.; HORJALES, E.; MUNTE, C. E. ....                                                                                                                               | 333 |
| <b>PG199 - Engenharia de máquina de Stirling em armadilhas iônicas e protocolo de medida da função de distribuição do trabalho</b>                                                         |     |
| TEIZEN, V. F.; MOUSSA, M. H. Y. ....                                                                                                                                                       | 334 |
| <b>PG200 - Coupling vortex dynamics with collective excitations in Bose-Einstein condensates</b>                                                                                           |     |
| TELES, R. P.; SANTOS, F. E. A.; BAGNATO, V. S. ....                                                                                                                                        | 335 |
| <b>PG201 - Planejamento estrutural por engenharia de cristais de uma nova modificação cristalina do fármaco antirretroviral de lamivudina (3TC): succinato monoidratado de lamivudina.</b> |     |
| TENORIO, J. C.; ELLENA, J.; OLIVEIRA, R. ....                                                                                                                                              | 336 |
| <b>PG202 - Estrutura da enzima methilthioadenosina fosforilase (MTAP) de Schistosoma mansoni mutante S12T em complexo com methilthioadenosina</b>                                          |     |
| TORINI, J. R.; BRANDÃO NETO, J.; PEREIRA, H. M. ....                                                                                                                                       | 338 |
| <b>PG203 - Interacting studies of PelD and PelF, proteins involved on biofilm formation in Pseudomonas aeruginosa</b>                                                                      |     |
| TORRES, N. U.; NAVARRO, M. V. A. S.....                                                                                                                                                    | 340 |



|                                                                                                                                                                                                                                                            |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>PG204 - NMR multi decay processing for well logging and laboratory applications</b><br>TREVIZAN, W. A.; BONAGAMBA, T. J. ....                                                                                                                           | 342 |
| <b>PG205 - Fluorescence correlation spectroscopy studies: Probing single protein inside cells</b><br>TSUTAE, F. M.; MOREIRA, H. H. T.; GUIMARAES, F. E. G. ....                                                                                            | 344 |
| <b>PG206 - Investigação da interação entre nanopartículas metálicas e sistemas fotossintéticos</b><br>VALENTE, G. T.; GUIMARAES, F. E. G. ....                                                                                                             | 345 |
| <b>PG207 - Computação quântica adiabática usando qubits supercondutores</b><br>VARGAS, J. A.; BRITO, F. ....                                                                                                                                               | 346 |
| <b>PG208 - Quantitative analysis for the study of arts evolution</b><br>VIEIRA, V.; SBRISSA, D.; FABBRI, R.; FONTOURA DA COSTA, L.; TRAVIESO, G. ....                                                                                                      | 347 |
| <b>PG209 - Armadilha 2D de potássio para produção e estudo de um condensado de duas espécies: Na/K</b><br>VIVANCO, F. A. J.; PEÑAFIEL, E. E. P.; PAIVA, R. R.; KRUGER, A. L.; THOMPSON, K. J.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S.; COURTEILLE, P. W. .... | 348 |
| <b>PG210 - Modelagem de grãos confinados em invólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem</b><br>VRECH, G.; COSTA, L. F. ....                                                                                                                  | 349 |
| <b>PG211 - Imagem de fluorescência usando filtro variável de cristal líquido em doenças de citros</b><br>WETTERICH, C. B.; MARCASSA, L. G. ....                                                                                                            | 350 |
| <b>PG212 - Alternative numerical renormalization-group method in measuring the Kondo screening cloud</b><br>ZAWADZKI, K.; OLIVEIRA, L. N. ....                                                                                                             | 351 |
| <b>PG213 - Structural and Functional characterization of Schistosoma mansoni septins</b><br>ZEIRAK, A. E.; RINALDI, G.; GARRATT, R. C.; ARAUJO, A. P. U.; BRINDLEY, P. J.; De MARCO, R. ....                                                               | 353 |



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

## IC1

### Desenvolvimento de novas matrizes mesoporosas sol-gel e a incorporação de materiais luminescentes orgânicos

ANJOS, C. F.<sup>1</sup>; ECKERT, H.<sup>1</sup>; SILVA, R. J. M.<sup>1</sup>

cayke.anjos@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Matrizes vítreas mesoporosas dopadas com corantes luminescentes, como, por exemplo, a Rodamina 6G, têm encontrado espaço na área de fotônica ao servirem de substrato para lasers de estado sólido, em especial os lasers de estado sólido de corantes, LEDs orgânicos e no desenvolvimento de dispositivos de sensoriamento biológico, os biosensores. (1) Desse modo, o desenvolvimento de matrizes que consigam incorporar esses corantes de maneira homogênea torna-se essencial para o próprio progresso da fotônica. Neste projeto, focou-se na produção de uma matriz ternária dopada com sódio,  $(\text{Na}_2\text{O})_x[(\text{AlPO}_4)_{0,5}-(\text{SiO}_2)_{0,5}]_{1-x}$ , pela via de síntese sol-gel e em sua caracterização. Tal destaque se dá por trabalhos anteriores que mostraram que a matriz ternária  $\text{AlPO}_4\text{-SiO}_2$  não apresentava homogeneidade nos sítios aniônicos de aluminato ( $\text{AlO}_4^-$ ), o que levaria a uma distribuição incoerente do luminescente, mas a adição de sódio tornava o arranjo de aluminatos mais coeso. (2) Relata-se o resultado dos testes de adsorção e dessorção do gás nitrogênio conjuntamente com os resultados dos algoritmos de BJH (Barrett-Joyner-Halenda), para avaliação do diâmetro de poro, e de BET (Brunauer-Emmet-Teller), para análise da área superficial. O material possui uma isoterma do tipo IV o que indica que a matriz possui mesoporos e alta área superficial. Além disso, os espectros de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) do alumínio mostraram que as amostras apresentavam maior tendência a formar estruturas octaédricas, pico localizado no espectro por volta de -1ppm, no lugar de tetraédricas, pico findado em torno de 40ppm. Descobriu-se que tal tendência devia-se a incorporação de moléculas de água originadas do próprio ambiente em consequência da alta higroscopicidade do vidro. Para comprovar-se tal hipótese, submeteram-se as amostras por 12 horas a 100 graus Celsius antes de refazer o RMN do mesmo elemento e notou-se que o espectro deslocou-se um pouco mais em direção ao alumínio tetracoordenado. Em suma, o presente estudo confirma a mesoporosidade e a alta área superficial da matriz sódio aluminofosfossilicato, mas vai de encontro a resultados anteriores, devido ao desconhecimento da grande higroscopicidade do vidro e facilidade do alumínio de formar estruturas octaédricas pela interação dos aluminatos presentes na superfície do vidro com a água da atmosfera. Experimentos futuros de spin echo decay de sódio levarão a conclusão de como o sódio encontra-se na amostra: se esse elemento está disperso de forma homogênea ou agregado, formando clusters.

**Palavras-chave:** Síntese sol-gel. Vidro aluminofosfossilicato. Ressonância magnética nuclear.

#### Referências:

1 SARAVANAPAVAN, P.; JONES, J. R.; PRYCE, R. S.; HENCH, L. L. Bioactivity of gel-glass powders in the  $\text{CaO-SiO}_2$  system: a comparison with ternary ( $\text{CaO-P}_2\text{O}_5\text{-SiO}_2$ ) and quaternary glasses

(SiO<sub>2</sub>-CaO-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-Na<sub>2</sub>O). **Journal of Biomedical Materials Research A**, v. 66A, n.1, p.110-119, 2003.

2 DESHPANDE, R. R. **Structural investigation of alumina containing phosphate glasses by high resolution solid state NMR spectroscopy**. Münster: 2009.

## IC2

# Statistical features of neuronal avalanches and local field potentials

CARVALHO, M. M.<sup>1</sup>; MOSQUEIRO, T. S.<sup>1</sup>; MAIA, L. P.<sup>1</sup>

milena.carvalho@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Biological sensory networks rely on complex mechanisms of information processing to characterize external environments. In the presence of a stimulus, receptors transform these physicochemical data into trains of spikes which propagate through the sensory network. The possible activity patterns, which can be immensely rich, are known as neuronal avalanches and have been recorded in several biological systems in the last decade, both in vitro and in vivo. Surprisingly, these patterns almost always reveal power laws for the size and duration of these avalanches, which is a strong indicative that the collective dynamics of the units of the network can be related, in some way, to a phase transition. (1) More recently, it was shown that the long-range correlations often present in critical effects on brain dynamics may link completely different time scales, being strongly related to (and possibly the origin of) slow alpha oscillations, up to the order of seconds. (2) To sort this out, we are studying how the complex behavior of ensembles of formal and (somewhat) realistic neurons give rise to critical avalanches and slow oscillations. To do so, however, it is necessary to better understand how local field potentials are affected by the avalanches. As other authors reported, this is not only far from a complete understanding, but also not trivial. (3) Here we present the initial steps of our statistical procedure and numerical workbench to (i) simulate a neural population with general properties, (ii) evaluate a coarse-grained measure supposed to be comparable with local field potential and finally (iii) extract from this signal avalanche statistics and the slow dynamics. We explored some of the parameters space of our model to assess different scenario (synchronization, slow oscillations, etc) in both time scales.

**Keywords:** Criticality. Avalanches. Neural dynamics.

### Referências:

- 1 MOSQUEIRO, T. S.; MAIA, L. P. Optimal channel efficiency in a sensory network. **Physical Review E**, v. 88, n. 1, p. 12712-1-12712-6, 2013.
- 2 POIL, S. S. et al. Critical-state dynamics of avalanches and oscillations jointly emerge from balanced excitation/inhibition in neuronal networks. **Journal of Neuroscience**, v. 32, n. 29, p. 9817-9823, 2012.
- 3 DEGHANI, N. et al. Avalanche analysis from multielectrode ensemble recordings in cat, monkey, and human cerebral cortex during wakefulness and sleep. **Frontiers in Fractal Physiology**, v. 3, p. 302-1-302-18, 2012. doi:10.3389/fphys.2012.00302.

## IC3

# Nanopartículas magnéticas recobertas com ouro para aplicações em nanomedicina

FRANCO, F. F.<sup>1</sup>; MARANGONI, V. S.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

fabiane.franco@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Nanopartículas magnéticas têm se mostrado eficazes em aplicações médicas como no diagnóstico precoce e tratamento de câncer, atraindo interesse de estudos mais aprofundados e de síntese de nanocompósitos contendo dois ou mais materiais. No entanto, o desenvolvimento de nanocompósitos de diferentes componentes ainda apresenta muitos desafios, como dificuldade do controle dos parâmetros de síntese e baixa estabilidade. O objetivo do presente trabalho consiste em sintetizar nanopartículas magnéticas recobertas com ouro a fim de promover uma maior estabilidade em meio aquoso além de obter as propriedades características de ambos os materiais. Para isso, nanopartículas de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  foram sintetizadas em uma reação de decomposição térmica na presença de acetilacetato de ferro(III), 1,2-hexadecanodiol, ácido oléico e oleilamina em benzil eter. (1) Em seguida, duas estratégias foram utilizadas. Na primeira delas, as nanopartículas hidrofóbicas foram funcionalizadas com 3-aminopropiltrimetoxissilano, APTS, e, então, nanopartículas de ouro (AuNPs) de tamanho reduzido foram depositadas sobre sua superfície. Já na segunda, as nanopartículas foram recobertas com uma camada de  $\text{SiO}_2$  e, então, funcionalizadas com APTS e AuNPs. As nanopartículas foram separadas magneticamente e redispersas em água. Em ambos os casos, a finalização da camada de ouro foi obtida por meio da redução de ouro nos sítios de nucleação (AuNPs) usando carbonato de potássio e sal de ouro na presença de formaldeído. Além da maior estabilidade, essas partículas apresentaram tanto propriedades magnéticas provenientes do núcleo de ferro quanto absorção da luz em torno de 520 nm proveniente da camada de ouro, tornando-as interessantes para muitas aplicações.

**Palavras-chave:** Nanopartícula magnética. Core-shell. Nanocompósito.

## Referências:

1 SUN, S. et al. Monodisperse  $\text{MFe}_2\text{O}_4$  ( $\text{M} = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Mn}$ ) nanoparticles. **Journal of the American Chemical Society**, v. 126, n. 1, p. 273-279, 2004.

## IC4

# Comparison between alternating and continuous optical molasses

GOMES, N. D.<sup>1</sup>; CARACANHAS, M. A.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

naomyduarteg@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The technique of laser cooling, whose basic idea was proposed in 1975 (1), provides the development of many important areas like atomic clocks and quantum gases. Among the techniques applied to cooling neutral atoms is the optical molasses, that will be explored. However, instead of study a standard molasses, here we propose a new alternate molasses configuration. The possibility of turn on just one pair of counter-propagating lasers beams per time, that is, alternate between the three spatial direction, reduce the energy supply of a traditional laser beam configuration, without significant changes in the minimum of energy and in the cooling time. We will show that, for an standart 3D molasses, the minimum of energy reached is  $E_{standart} = \frac{3\gamma}{\beta}$ , where  $\gamma$  and  $\beta$  are two parameters dependent of some characteristics of the atom used (as the saturation parameter, mass and natural lifetime) and the detunning, which is the difference between the laser frequency and the atomic resonant frequency. Meanwhile, the minimun of energy reached by our alternate molasses is  $E_{alternate} = \frac{6\gamma}{\beta}$ . Since the ratio  $\frac{\gamma}{\beta}$  is very small (the order of  $10^{-28}$ ), this two minimuns of energy are very close, but each one is reached at different times, that depends on the atom we are using. For sodium atoms, the time for the standart 3D molasses is approximately  $300\mu s$ , while for the alternate 3D molasses the time is approximately  $365\mu s$ , and we can see that the time of cooling for both techniques are close, and both can reach the same Doppler-cooling limit (2). Therefore, we can consider alternate molasses as a better option, not only because it takes the atomic sample until Doppler-limit cooling with approximately the same cooling time, but also for being a system in which the laser beams do not remain all turned on at the same time. This difference is critical when dealing with the problem involving the density of cooled atoms, which must be high in order to accomplish the trapping. What happens is that the rate of spontaneous emission of photons, which increases with the light intensity on atoms, decreases the density of the cooled sample. The ideia proposed by Ketterle *et al* (3) is that this problem can be solved when only part of the atomic sample interacts with the laser beams and the remaining atoms are thermalized through collisions with atoms cooled by the laser. In our proposed alternate optical molasses, on the other hand, the spontaneous emission rate is smaller as the laser beams are alternate in time, so that the total intensity of light to which the sample is subjected is three times smaller than in the case of standart 3D molasses. Therefore, our trapping system is also able to circumvent the problem of the density of the sample cooled, increasing it and contributing to the subsequent evaporative cooling of the sample trapped.

**Keywords:** Optical molasses. Alternate optical molasses. Laser cooling.

### Referências:

1 PHILLIPS, W. D. Laser cooling and trapping of neutral atoms. **Reviews of Modern Physics**, v.70,

n. 3, p. 729-741, 1998.

2 LETT, P. D.; PHILLIPS, W. D.; ROLSTON, S. L.; TANER, C. E.; WATTS, R. N.; WESTBROOK, C. I. Optical molasses. **Journal of the Optical Society of America B**, v. 6, n. 11, p. 2084-2107, 1989.

3 KETTERLE, W.; DAVIS, K. B.; JOFFE, M. A.; MARTIN, A.; PRITCHARD, D. E. High densities of cold atoms in a dark spontaneous-force optical trap. **Physical Review Letters**, v. 70, n. 15, p. 2253-2256, 1993.



## IC5

# Uma análise da influência da altitude na performance do Cherenkov Telescope Array

LANG, R. G.<sup>1</sup>; DE SOUZA, V.<sup>1</sup>

rodrigo.lang@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O Cherenkov Telescope Array (CTA) (1) é uma colaboração internacional com participação de 27 países e mais de 1000 membros que tem como intuito construir uma nova geração de telescópios terrestres sensíveis à radiação gama para estudar astrofísica de partículas cósmicas. O experimento encontra-se em fase de estudo e está sendo desenvolvido para se obter uma sensibilidade 10 vezes maior que quaisquer dos observatórios de astronomia gama existentes no mundo. Um dos estudos importantes da fase inicial do experimento é a busca pelo sítio no qual o observatório será construído. Este trabalho insere-se nestes esforços e tem como objetivo uma análise da influência da altitude na performance do experimento. Utilizando-se de simulações completas de chuveiros atmosféricos com diferentes altitudes e em diferentes configurações de telescópios, é possível calcular parâmetros importantes de um observatório, como sensibilidade, resolução angular e área efetiva. Neste trabalho, simulações de chuveiros iniciados por raios gama e por prótons e elétrons (ruído) e sua detecção por uma super configuração de centenas de telescópios foram utilizadas (2). A partir dessa super configuração, pode-se analisar a eficiência de sub-configurações que podem ser utilizadas pelo observatório. Foram escolhidas diferentes sub-configurações com três diferentes tamanhos de telescópios e duas altitudes diferentes (2000 m e 3700 m). Dessa forma, este trabalho pôde comparar as vantagens e as desvantagens de cada altitude e buscar o posicionamento ótimo para os telescópios, bem como o número total destes, para cada altitude. Como resultados principais, foram obtidos a região de energia para a qual cada tamanho de telescópio é predominante, a separação ideal para telescópios médios em cada altitude e o cálculo de que um telescópio grande a mais é suficiente para que a performance a 2000 m se equivalha à performance a 3700 m.

**Palavras-chave:** CTA. Monte Carlo. Cherenkov.

### Referências:

- 1 ACTIS, M. et al. Design concepts for the Cherenkov Telescope Array. **Experimental Astrophysics**, v. 32, n. 3, p. 193-316, 2011.
- 2 BERNLÖHR, K. et al. Monte Carlo design studies for the Cherenkov Telescope Array. **Astroparticle Physics**, v. 43, p. 171, 2013. doi: 10.1016/j.astropartphys.2012.10.002.

## IC6

### Isolamento de membranas de linhagem celular para aplicação em modelos de membrana em estudos de nanotoxicidade

LINS, P.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>; CANCINO, J.<sup>1</sup>

ppincela@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Apesar do rápido progresso da nanomedicina, os efeitos toxicológicos devido à exposição prolongada desses nanomateriais, ainda não são bem definidos. Nesse sentido, a nanotoxicologia tem como papel analisar as interações de nanomateriais com sistemas biológicos, com ênfase na indução das possíveis respostas tóxicas. (1) As interações entre as propriedades físicas e químicas de nanoestruturas em sistemas biológicos podem fornecer uma base para a avaliação da resposta tóxica e, mais importante podem conduzir a modelos preditivos para avaliar a toxicidade. (1,2) Por isso, as interações das nanopartículas e sistemas celulares torna-se bastante proeminente, na tentativa de entender os eventos biomoleculares gerados por esse material. E uma das possíveis interações a serem investigados é o mecanismo pelo qual as nanoestruturas atravessam as membranas celulares. Esse projeto tem como objetivo avaliar a toxicidade de nanomateriais através de uma metodologia desenvolvida por nosso grupo, utilizando modelos de membranas celulares. (2) Neste contexto, nanopartículas de ouro estabilizadas com citrato (AuCit) e nanorods de ouro (AuRD) foram utilizados em estudos in vitro utilizando uma linhagem celular leucêmica, NB4. Para os estudos de modelos de membrana, os fosfolípidos dipalmitoilfosfatidilcolina (DPPC) e dipalmitoilfosfatidilglicerol (DPPG) foram usados para mimetizar uma membrana celular por meio da técnica de Langmuir. Os resultados in vitro obtidos por meio da citometria de fluxo revelaram que os AuRDs influenciaram significativamente os processos de apoptose e de necrose, em concordância com estudo de Langmuir que propôs uma interação relevante com DPPC e DPPG comparados ao AuCit. A partir disso, as possíveis interações entre a membrana extraída, com protocolo já estabelecido, e nanomateriais serão investigadas através da técnica de Langmuir, sendo uma abordagem inédita na literatura. Portanto, essas investigações podem ser de grande importância para a compreensão da toxicidade dos nanomateriais em escala molecular e trazer importantes benefícios para o desenvolvimento da nanomedicina.

**Palavras-chave:** Membrana real. Langmuir. Nanotoxicidade.

#### Referências:

- 1 ASHARANI, P. V.; MUN, G. L. K.; HANDE, M. P.; VALIAYAVEETIL, S. Cytotoxicity and genotoxicity of silver nanoparticles in human cells. **ACS Nano**, v. 3, n. 2, p. 279-290, 2009.
- 2 CANCINO, J.; NOBRE, T. M.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; MACHADO, S. A. S.; ZUCOLOTTO, V. A new strategy to investigate the toxicity of nanomaterials using Langmuir monolayers as membrane models. **Nanotoxicology**, v. 7, n. 1, p. 61-70, 2013.

## IC7

### Tempo de vida de fluorescência para detecção de melanoma

NOGUEIRA, M. S.<sup>1</sup>; PIRES, L.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

marcelo.saito.nogueira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O melanoma é a neoplasia maligna de pele mais agressiva. É responsável por cerca de 80 a 85% dos óbitos por tumores cutâneos diagnosticados no Brasil, apesar de representar cerca de 5% destes tumores. (1) Atualmente, para um diagnóstico definitivo de melanoma, é necessário fazer uma biópsia, que pode contribuir para que as células do tumor se espalhem para outros órgãos do corpo. Desse modo, seria necessário um diagnóstico não-invasivo para a prevenção desse tipo de situação, de maneira que se possa diferenciar o tecido sadio e o tumoral nos primeiros estágios do melanoma. Através de técnicas de uorescência, informações sobre a organização e composição química dos tecidos podem ser obtidas sem necessidade de biópsia. A fim de verificar se a técnica de espectroscopia de uorescência resolvida no

tempo é capaz de diferenciar o tecido sadio do tumoral, foi utilizado um sistema de uorescência resolvida

no tempo com um bundle de fibras e uma sonda bifurcada de investigação acopladas a dois lasers, um emitindo em 378 nm e o outro em 445 nm (BDL-375-SMC e BDL-445-SMC, Becker and Hickl, Berlin, Alemanha), que são usados como fontes de luz para excitação do NADH e FAD, respectivamente. O fotodetector utilizado foi uma fotomultiplicadora híbrida (HPM-100-50, Becker and Hickl, Berlin, Alemanha) praticamente livre do efeito de after-pulsing, que pode interferir com as medidas de tempo de vida. O modelo animal consiste de camundongos NUDE, nos quais foi realizada injeção intradérmica de  $10^7$  células de melanoma murino (B16F10). As medidas de tempo de vida médio, nos dois comprimentos de onda de 378 nm e 445 nm, foram efetuadas em 5 pontos do tecido sadio e de cada tumor 7 dias após a inoculação destes. Para manter a fibra limpa, foi utilizado um filme de PVC. As potências médias utilizadas foram de 190  $\mu$ W e 41  $\mu$ W, respectivamente, para os comprimentos de onda de 378 nm e 445 nm, com taxa de repetição de 50 MHz e tempo de integração de 5s. Dois filtros, centrados em 450 nm e 510 nm, foram utilizados na frente do detector para extrair principalmente os sinais devidos ao NADH e ao FAD, respectivamente. Essas biomoléculas podem fornecer informações sobre o metabolismo da célula, uma vez que estão envolvidas na respiração celular. (2) Cada perfil de decaimento adquirido foi processado através do programa SPCImage. Tanto na excitação em 378nm quanto em 445nm, a curva de decaimento foi ajustada por uma bi-exponencial. De acordo com os gráficos obtidos, foi possível diferenciar o tecido sadio e o tumor a partir dos tempos de vida médios para excitação a 378 nm e 445 nm. A próxima etapa será acompanhar as medidas para o tumor em função do tempo durante a terapia fotodinâmica. Ainda que preliminares, esses resultados evidenciam que a técnica de tempo de vida médio de

uorescência pode ser utilizada para fornecer informações importantes em relação ao metabolismo celular e pode vir a se tornar uma ferramenta para o diagnóstico não invasivo do melanoma.

**Palavras-chave:** Fluorescência. Diagnóstico. Melanoma.

## Referências:

1 BRASIL. Ministério da Saúde. Instituto Nacional de Câncer. **Estimativa 2012**: incidência de câncer no Brasil. Rio de Janeiro: INCA, 2011.

2 SKALA, M. C.; RICHING, K. M.; GENDRON-FITZPATRICK, A.; EICKHOFF, J.; ELICEIRI, K. W.; WHITE, J. G.; RAMANUJAM, N. In vivo multiphoton microscopy of NADH and FAD redox states, fluorescence lifetimes, and cellular morphology in precancerous epithelia. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 104, n. 49, p. 19494-19499, 2007.

## IC8

### **Avaliação do tratamento in vitro das células do melanoma humano e murino através da terapia fotodinâmica com diferentes fotossensibilizadores**

ONO, B. A.<sup>1</sup>; PIRES, L.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

bruno.ono@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer de pele é o mais freqüente no Brasil, correspondendo a 25% de todos os tumores malignos sendo que em 2012 houve 6.230 novos casos de acordo com o INCA (Instituto Nacional de Câncer). Um dos tipos de câncer de pele é o melanoma cutâneo, que atinge os melanócitos, células que produzem a melanina, molécula que confere a tonalidade de pele. O melanoma representa apenas 4% das neoplasias malignas do órgão e é considerado o mais grave devido à sua alta possibilidade de metástase. O tratamento mais recomendado é a cirurgia que, dependendo do estágio, pode ser tratado com quimioterapia ou radioterapia, que consiste de procedimentos agressivos. (1-2) Diante das poucas opções de tratamentos, a terapia fotodinâmica (PDT, Photodynamic Therapy) é uma modalidade emergente de tratamento da doença, ainda com o diferencial de não ser invasiva. Ela é baseada na ativação de compostos químicos, chamados de fotossensibilizadores, apenas através da irradiação com comprimento de onda específico. Estes geram compostos reativos de oxigênio que destroem as células somente na região a ser tratada, na qual há exposição à luz.(3) O presente estudo tem como objetivo pesquisar a viabilidade de células de melanoma humano e murino na presença de diversos fotossensibilizadores e a eficácia destes no tratamento da PDT. Os melanócitos adquiridos de murino são cultivados em meio DMEM e humano em meio McCoy's 5A enriquecidos com soro fetal bovino, além de possuírem um controle de 5% CO<sub>2</sub> a uma temperatura de 37 na estufa. Para estudar a viabilidade, as células são depositadas em uma placa multi poços, por volta de 5.10<sup>4</sup> células/poço e são deixadas overnight para aderirem a placa. Após isto, os melanócitos são testados com diversas concentrações de fotossensibilizadores com diferentes tempos de incubação de 0,5h, 1h e 2h. A viabilidade é medida com MTT (Sigma, ensaio in vitro toxicológico), que determina o funcionamento da mitocôndria. Os ensaios de PDT foram feitos na Biotable 660nm para Photodithazine®(PDZ) e a fluência é verificada para melhorar a eficácia. As baixas concentrações de fotossensibilizador, entre 10 a 100 nanogramas por mililitro, não mostrou citotoxicidade no escuro, para as incubações de 0,5h a 2h. Isto levou aos ensaios de PDT nestas concentrações, e foi verificada uma variação de viabilidade de 6% a 60% das células de melanoma murino, entre as faixas de 0,33 J/cm<sup>2</sup> a 2 J/cm<sup>2</sup>, além de evidenciar que o fotossensibilizador penetrou nas células, a PDT a baixas concentrações foi eficiente. Apesar da alta viabilidade para algumas condições, vemos que é possível utilizar outras concentrações não tóxicas e ainda aumentar o tempo de irradiação, melhorando assim, a eficácia da terapia. Porém sabemos que as células são agrupadas nos poços em monocamada, e isto facilita o tratamento in vitro, pois um sério problema do tratamento da PDT nesta doença é a penetração da luz no tumor, portanto, isto exige novos experimentos com diversos estágios das células com baixa a alta concentração de melanina.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Melanoma melanócito. Estudo in vitro.

## Referências:

- 1 CHOROMANSKA, A.; SACZKO, J.; KULBACKA, J.; SKOLUCKA, N.; MAJKOWSKI, M. The potential role of photodynamic therapy in the treatment of malignant melanoma, an in vitro study . **Advances in Clinical and Experimental Medicine**, v. 21, n. 2, p. 179-185, 2012.
- 2 HUANG, Y.Y.; VECCHIO D; AVCI, P.; YIN, R.; GARCIA-DIAZ, M.; HAMBLIN, M.R. Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry**, v. 394, n. 2, p. 239-250, 2013 .
- 3 ZHU, T. C.; FINLAY, J. C. The role of photodynamic therapy (PDT) physics. **Medical Physics**, v.35, n.7, p. 3127- 3136, 2008.

## IC9

### **Avaliação de textura de solos utilizando espectroscopia de plasma induzido por laser - LIBS**

ROMANO, R. A.<sup>1</sup>; NICOLODELLI, G.<sup>2</sup>; VILLAS BOAS, P.R.<sup>2</sup>; FERREIRA, E. C.<sup>3</sup>; MILORI, D.M.B.P.<sup>2</sup>

renan.romano@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>EMBRAPA - CNPDIA

<sup>3</sup>Instituto de Química - UNESP

Devido ao constante crescimento do mercado brasileiro agropecuário, o desenvolvimento de instrumentação para agricultura de precisão tem sido cada vez mais importante. Atualmente o estudo e desenvolvimento de técnicas ópticas têm ganhado grande destaque devido à vasta aplicabilidade, baixo custo e potencial de expansão para os mais diversos estudos e determinações. A técnica de ablação por laser, LIBS (acrônimo do inglês Laser-Induced Breakdown Spectroscopy), consiste de uma análise espectroscópica do plasma gerado por um pulso de laser incidente na amostra. Esta tecnologia tem as seguintes vantagens em comparação com as técnicas convencionais de espectroscopia: analisa amostras nas fases sólida, líquida ou gasosa; realiza medidas em poucos segundos; é apropriada para a medição em tempo real; requer pouco ou nenhum preparo de amostra; proporciona pouco dano à amostra durante a análise; permite quantificar qualquer elemento químico; e é passível de ser compactada e levada a campo. Devido às vantagens acima, LIBS é amplamente aplicado em muitos campos e é, de fato, uma das técnicas ópticas com maior potencial de caracterização elementar rápida de materiais(1). O objetivo deste trabalho é avaliar o potencial da técnica em determinar características físicas da amostra, neste caso a textura (granulometria) de solos, visto que esta influencia diretamente na agregação, porosidade, e armazenamento de água do solo, sendo assim um fator importante a ser determinado(2). Foram utilizadas 60 amostras de solos de diversas regiões cujas quantidades de areia, silte e argila foram determinadas pelo método da pipeta. Foram realizadas 60 medidas LIBS por amostra, e apenas a região espectral de 384 a 507 nm foi utilizada para gerar um modelo de calibração para estas frações. Todos os espectros foram previamente corrigidos extraindo o offset, de forma a existir um padrão que pudesse ser comparado e analisado. Através do método de regressão linear de mínimos quadrados parciais (PLSR) realizado por meio de validação cruzada, foi gerado um modelo de calibração para cada componente da textura, cujas correlações foram de 0.93 para a argila e a areia e 0.89 para o silte, tendo em média 33% de erro relativo médio. Isso nos mostra que a técnica tem alta possibilidade de estimar, não só elementos químicos, como também características físicas da amostra. O erro, ligeiramente alto, pode ser compensado pelos fatores da rapidez, baixo custo, e capacidade de determinação de mais de uma propriedade física ou química da amostra com apenas uma medida. Além disso, também há a possibilidade levar a técnica a campo para gerar mapas completos das características do solo de uma região.

**Palavras-chave:** Espectroscopia de plasma induzido por laser. Textura de solos. Ablação a laser.

### Referências:

1 SANTOS JUNIOR, D.; TARELHO, L. V. G.; KRUG, F. J.; MILORI, D. M. B. P.; MARTIN NETO, L.; VIEIRA JUNIOR, N. D. Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por laser (LIBS) - fundamentos, aplicações e perspectivas. **Revista Analytica**, n. 24, p. 72-81, ago./set. 2006.

2 GOLBERG, P.; MACPHAIL, R. I. **Practical and theoretical geoarchaeology**. Malden: Blackwell Publishing Oxford, 2006.



## IC10

### Sincronização de redes complexas

SANTOS, E. R. dos<sup>1</sup>; RODRIGUES, F. A.<sup>2</sup>

edmilson.roque.santos@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Sistemas complexos são formados por partes discretas que interagem de forma não-linear e podem ser representados como redes complexas. Estas, por sua vez, são elementos que permitem uma rica análise de diversos problemas, baseando-se em uma simples estrutura matemática chamada grafo.(1) As propriedades relacionadas ao grafo quando calculadas, simulam quali e quantitativamente diversos sistemas. A análise de tais sistemas tem importância fundamental no estudo do cérebro, da sociedade, da Internet, da Teia Mundial e de cadeias alimentares. Muitos processos dinâmicos podem ser simulados e modelados em topologias complexas, tais como sincronização e falhas em cascata. Nesse trabalho, objetivamos o contato parcial do aluno nesta área relativamente nova, e focamos nossa análise à dinâmica de sincronização de osciladores em redes complexas, que foi modelado por Kuramoto. (2-3) Verificamos como a organização de redes está relacionada com a emergência do estado síncrono e mostramos que esse fenômeno é altamente dependente da estrutura da rede.

**Palavras-chave:** Redes complexas. Sincronização. Modelo de Kuramoto.

#### Referências:

1 BOCCALETTI, S.; LATORA, V.; MORENO, Y.;CHAVEZ, M.; HWANG, D. U. Complex networks: structure and dynamics. **Physics Reports**, v. 424, n. 4-5, p.175-308, 2006.

2 ACEBRÓN, J. A.; BONILLA, L. L.; PÉREZ VICENTE, C. J.; RITORT, F.; SPIGLER, R. The Kuramoto model: a simple paradigm for synchronization phenomena. **Review of Modern Physics**, v. 77, n., p.137-185, 2005.

3 ARENAS, A.; DÍAZ-GUILERAC, A.; KURTHSD, J.; MORENOB, Y.; ZHOUG, C. Synchronization in complex networks. **Physics Reports**, v. 469, n.3, p.93-154, 2008 .

## IC11

### Estudos estruturais e cinéticos da enzima desoxicitidilato desaminase de *Schistosoma mansoni*

SCORTECCI, J. F.<sup>1</sup>; SERRÃO, V. H. B.<sup>1</sup>; PEREIRA, H. D. P.<sup>1</sup>

jessica.scortecchi@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A esquistossomose é uma doença negligenciada que não atrai grandes investimentos de empresas do mercado farmacêutico na busca por potenciais fármacos. (1) A enzima Desoxicitidilato Desaminase (DEOC) é uma das enzimas do ciclo do timidilato do parasita *Schistosoma mansoni* causador da doença. Sendo esta uma das vias metabólicas essenciais do organismo, atuando na desaminação irreversível hidrolítica do deoxicitidina- 5'-monofosfato (dCMP) para deoxiuridina- 5'-monofosfato (dUMP) para prover o substrato para a Timidilato sintase, um passo fundamental na síntese de nucleotídeos estruturais (DNA e RNA) e energéticos (UTP). (2) Esse trabalho tem como objetivo a determinação de um modelo cinético permitindo a longo prazo busca por possíveis inibidores e também a obtenção de um modelo estrutural que viabilize a compreensão das interações sítio específicas contribuindo assim com o aumento do conhecimento sobre as vias fundamentais do parasita. (3) Para isso, será empregado a técnica de expressão heteróloga em sistema *Escherichia coli* BL21(DE3) do clone *SmDEOC* em vetor pET28a (Novagen), purificação por cromatografia por afinidade e exclusão molecular após a clivagem do His-TAG com trombina, validação através de SDS-PAGE e eletroforese nativa. Os ensaios cinéticos serão realizados por meio fluorimétrico monitorando a redução da absorção em 290 nm (comprimento de onda relacionado ao dCMP). A obtenção do modelo estrutural será empregando difração de raios-X em monocristal formado pelo método de difusão de vapor em gota suspensa. O cDNA de *SmDEOC* foi amplificado, a enzima recombinante expressa e caracterizada como um hexâmero estável em solução (118 kDa) pela análise do perfil cromatográfico e eletroforese na ausência de SDS e condições desnaturantes. Medidas utilizando técnicas espectrofotométricas como dicroísmo circular, fluorescência intrínseca e espalhamento dinâmico de luz revelaram a baixa estabilidade térmica da amostra e sua distribuição oligomérica em solução em função da temperatura, o que justifica a presente dificuldade de obter resultados positivos nos ensaios de cristalização. Novas tentativas em ensaios estão sendo realizadas afim de obter monocristais para experimentos de difração de raios-x. A determinação estrutural desta enzima bem como a compreensão de seus parâmetros cinéticos será de grande valia para o entendimento dessa via essencial ao organismo.

**Palavras-chave:** Esquistossomose. Timidilato. Cristalografia.

#### Referências:

- 1 CONTEH, L.; ENGELS, T.; MOLYNEUX, D. H. Socioeconomic aspects of neglected tropical diseases. **Lancet**, v. 375, n. 9710, p. 239-247, Jan. 2010.
- 2 SENFT, A. W.; CRABTREE, G. W. Purine metabolism in the schistosomes: potential targets for

chemotherapy. **Pharmacology and Therapeutics**, v. 20, n. 3, p. 341-356, 1983.

3 MALEY, G. F.; MALEY, F. Nucleotide interconversions in embryonic and neoplastic tissues. I. the conversion of deoxycytidylic acid to deoxyuridylic acid and thymidylic acid. **Journal of Biological Chemistry**, v. 234, p. 2975-2980, 1959.

## IC12

### Geometrias clássicas e estrutura causal: uma abordagem sintética.

TEODORO, M. C.<sup>1</sup>; GROSSI, C. H. F.<sup>2</sup>

matheus.teodoro@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Este trabalho procura estudar várias geometrias "clássicas" de uma maneira sintética, unificada e livre de coordenadas. Ênfase especial é dada aos espaços de de Sitter  $dS^n$  e anti de Sitter  $AdS^n$ , que são variedades de Lorenz com curvatura constante largamente utilizadas na teoria da relatividade (mas muito úteis também em outras áreas da física e da matemática). A mencionada abordagem sintética, presente em (1-2), torna bastante explícita uma conhecida relação entre as métricas em  $dS^n/AdS^n$  e a estrutura conforme/causal nos (*absolutos*) destes espaços. Mais ainda, ela permite entender de modo bastante simples como a estrutura conforme/causal é de fato o que "resta" da métrica quando se chega ao absoluto. (Cabe ressaltar que a relação entre métrica e estrutura causal está no cerne da correspondência AdS/CFT e do princípio da holografia). (1) Esperamos que este tratamento irá "facilitar o trânsito" entre a física e a matemática no que diz respeito ao assunto em questão. Por fim, destacamos que as citadas estruturas conforme e causal são de fato casos particulares de uma construção muito mais geral. Grosso modo, esta construção permite que qualquer geometria clássica se manifeste como a "estrutura conforme" de outra. Como fruto do maior grau de generalidade, não é excluído que possamos provar alguns novos fatos úteis sobre a geometria dos espaços  $dS^n$  e  $AdS^n$ .

**Palavras-chave:** Anti de Sitter. Geometria . Estrutura causal.

#### Referências:

1 ANAN'IN, S.; GROSSI, C. H. Coordinate-free classic geometries. **Moscow Mathematical Journal**, v. 11, n. 4, p. 633-655, 2011.

2 ANAN'IN, S.; GONÇALVES, E. C. B.; GROSSI, C. H. **Grassmannians and conformal structure on absolutes**. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/0907.4469.pdf>>. Acesso em: 23 ago.2013.

## PG1

### **Building plant physiological models based at chlorophyll confocal fluorescence microscopy: imaging data analysis and metabolic network information.**

ALMEIDA FILHO, H. A.<sup>1</sup>; BRUNO, O. M.<sup>1</sup>

elfpedra@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The application of fluorescence imaging in plant research is growing rapidly mainly because these techniques allow to measure the relationships between molecular physiology, metabolism and ultra structure of living tissues. Among these techniques measurements of Chlorophyll fluorescence emission to imaging have been highly successfully used in enhancing our understanding of photosynthesis and plant physiology based on morphology at cellular and histological levels. With this work we will try to combine techniques of confocal fluorescence microscopy using chlorophyll as fluorescent probe, with image analysis and pattern recognition to provide information about morphological, physiological and metabolic rules at plant models. The plants will be growing over a variety of nutrient media and will be exposed to different physical and chemical conditions. The convergence of data from image analysis will be confronted with public data from metabolic network(1) reconstruction of plant models and will be used in the assembly functional models about their physiology.

**Palavras-chave:** Plant physiology. Image analysis. Pattern recognition.

#### **Referências:**

1 JEONG, H.; TOMBOR, B.; ALBERT, R.; OLTVAI, Z.N.; BARABASI, A.L. The large-scale organization of metabolic networks. **Nature**, v. 407, n. 6804, p. 651-654, 2000.

## PG2

### Hydrogenated amorphous silicon surface micromachined by femtosecond laser

ALMEIDA, G. F. B.<sup>1</sup>; CARDOSO, M. R.<sup>1</sup>; AOKI, P. H. B.<sup>2</sup>; CONSTANTINO, C. J. L.<sup>2</sup>; LIMA JÚNIOR, J. D.<sup>3</sup>; RODRIGUES, C. A.<sup>3</sup>; COSTA, L. F.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

gustavo.forestto.almeida@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Faculdade de Ciências e Tecnologias - UNESP

<sup>3</sup>Departamento de Ciências Exatas - Universidade Federal de Feira de Santana

Femtosecond laser micromachining has been shown to be of great relevance in many areas of applications. A good example of such relevance in technology is the radical change that occurs on silicon upon fs-pulse irradiation. The ability of changing optoelectronics proprieties was wisely used to improve significantly detectors, for instance. (1) In this work we used 150-fs laser at 775 nm, operating at a repetition rate of 1 kHz, to induce modifications on the surface of hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) thin films. The laser beam was focused with a  $f = 20$  centimeters lens (beam waist size at focus of 20 micrometers) on the surface of the sample, and scanned by controlling a pair of galvanometric mirrors. We carried out micromachining experiments using different pulse energies and scan speeds. After the laser treatment, micro-Raman spectroscopy revealed partial crystallization of a-Si:H and a decrease in the size of produced crystals. Atomic Force Microscopy (AFM) combined with a computational analysis of the surface morphology images was used to interpret the pattern produced by the laser. Our results indicate that for higher energy pulses the average height and radius, as well as its polydispersities, increased while the number of spikes decreased due to its agglomeration. The authors acknowledge FAPESP, CNPq, and CAPES for financial support, Andre Romero for technical assistance and Prof. Dr. Lino Misoguti for providing the sample.

**Keywords:** Femtosecondo laser. Micromachining. Amorphous silicon.

#### Referências:

1 TULL, B. R.; CAREY, J. E.; MAZUR, E.; MCDONALD, J. P.; YALISOVE, S. M. Silicon surface morphologies after femtosecond laser irradiation. **MRS Bulletin**, v. 31, n. 8, p. 626-633, Aug. 2006.

## PG3

### Natural products and synthetic compounds in the cancer research: biological screening of new antimetastatic agents

ALTEI, W. F.<sup>1</sup>; SALUM, L. de B.<sup>1</sup>; CHIARADIA, L. D.<sup>2</sup>; SECHINI, M. N.<sup>2</sup>; Evelyn Winter<sup>3</sup>; MATTEI, B.<sup>3</sup>; CANEVAROLO, R.I. R.<sup>4</sup>; SOUZA, C.<sup>4</sup>; DAGHESTANI, H. N.<sup>5</sup>; SANTOS-SILVA, M. C.<sup>6</sup>; CRECZYNSKI-PASA, T. B.<sup>3</sup>; YUNES, J. A.<sup>4</sup>; YUINES, R. A.<sup>2</sup>; NUNES, R. J.<sup>2</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>; DAY, B. W.<sup>7</sup>; VOGT, A.<sup>8</sup>

wanaltei@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Departamento de Química – UFSC

<sup>3</sup>Departamento de Ciências Farmacêuticas - UFSC

<sup>4</sup>Centro Infantil Boldrini - Campinas

<sup>5</sup>Department of Structural Biology - University of Pittsburgh

<sup>6</sup>Departamento de Análises Clínicas – UFSC

<sup>7</sup>Department of Pharmaceutical Sciences - University of Pittsburgh

<sup>8</sup>Drug Discovery Institute - University of Pittsburgh

Despite the development of advanced therapies, most cancer deaths are due to metastasis resistant to conventional treatments.(1) Aiming to find new molecules acting on metastasis of tumor cells, our group has evaluated series of synthetic and natural compounds for its ability to inhibit cancer cell migration, using the <wound healing> and Boyden-chamber assays. Besides biological screening, we performed structure-activity relationship studies to identify important chemical features of the compounds. By using this approach, we were able to find potent cell migration inhibitors belonging to diverse chemical classes, including natural and synthetic molecules. In addition, we developed more potent analogues, as the 3,4,5 trimetoxychalcones, planned after the study of the importance of the 3,4,5-trimethoxyphenyl motif for cell migration inhibition.(2) Although the mechanism of the effects of compounds on cell migration it's unclear, Together, our findings represent important improving toward the investigation of anti-metastatic compounds, showing cell-based biological screening as an important tool for Medicinal Chemistry applied to cancer research.

**Palavras-chave:** Cancer. Metastasis. Cell migration assay.

#### Referências:

- 1 FIDLER, I. J. Timeline - the pathogenesis of cancer metastasis the seed and soil hypothesis revisited. **Nature Reviews Cancer**, v.3, p.453-458, June 2003. doi:10.1038/nrc1098.
- 2 SALUM, L. B. et al. Cytotoxic 3,4,5-trimethoxychalcones as mitotic arresters and cell migration inhibitors. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v.63, p.501-10, 2013.



## PG4

### Probing the statistical properties of unknown texts

AMANCIO, D. R.<sup>1</sup>; ALTMANN, E.<sup>2</sup>; RYBSKI, D.<sup>3</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>;

COSTA, L. F.<sup>1</sup>diegoraphael@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme

<sup>3</sup>Potsdam Institute for Climate Impact Research

In the last few years, statistical physics methods have been employed to analyze large corpora. Nevertheless, no comprehensive investigation has been performed investigating the properties of statistical measurements across different languages and texts. In this study we propose a methodology that is able to determine the compatibility of an unknown text with a natural language, without any knowledge of the meaning of the words. The approach is based on three types of statistical measurements, i.e. obtained from first-order statistics of word properties in a text, from the topology of complex networks representing text, and from intermittency concepts where text is treated as a time series. (1) Comparative experiments were performed with the New Testament in 15 different languages and with distinct books in English and Portuguese in order to quantify the dependency of the different measurements on syntactical and on semantic factors. The metrics found to be informative in discriminating real texts from their shuffled versions include assortativity, degree and selectivity of words. As an application, we analyze an undeciphered medieval manuscript known as the Voynich Manuscript. We show that it is mostly compatible with natural languages and incompatible with random texts. We also obtain candidates for keywords of the Voynich Manuscript which could be helpful in the effort of deciphering it.

**Keywords:** Voynich manuscript. Complex networks. Pattern recognition.

#### Referências:

1 AMANCIO, D. R.; ALTMANN, E. G.; RYBSKI, D.; OLIVEIRA JUNIOR., O. N.; COSTA, L. F. Probing the statistical properties of unknown texts: application to the Voynich manuscript. **PLoS ONE** v.8, n.7, p.e67310.

## PG5

### Synthesis and properties of bi-layered $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$ ceramics

AMARAL, T. M.<sup>1</sup>; HERNANDES, A. C.<sup>1</sup>

thimaral@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

$BaTiO_3$  is a perovskite ferroelectric material with high scientific and technological appeal. The possibility of tuning its properties by substitutive doping turns it largely used in many devices such as resonators, filters and in 90 % of all  $10^{12}$  capacitors produced every year. (1) Among those dopants, an increasing substitution of  $Ti^{+4}$  by  $Zr^{+4}$  is known to continuously decrease the  $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$  solid-solution's Curie temperature, suppress oxygen vacancies and, in higher quantities ( $x > 0.25$ ), create non-polar nanoclusters that lead to a relaxor behavior. (2) Although  $Zr^{+4}$  increases electrical permittivity values on environmental temperature, reduces leakage current and prevents grain growth during  $BaTiO_3$  sintering, there are few reports studying  $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$  based heterostructures. So, the objectives of this research are: 1- produce bi-layered ceramic heterostructures based on  $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$ , 2- investigate their electrical properties and 3- monitor Zr diffusion in long sintering times.  $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$  ( $x=0, 0.05, 0.1, 0.15, 0.20$  and  $0.25$ ) powder was synthesized by the polymeric precursors method. Homogeneous and bi-layered samples were pelletized by uniaxial followed by isostatic pressure. Sintering was carried under  $1300\text{ }^{\circ}\text{C}$  in different dwell times and gold electrodes sputtered. Electrical hysteresis, pyroelectric coefficient and piezoelectric  $d_{33}$  coefficient were measured. SEM pictures and EDX measurements were done to verify microstructure and trace Zr composition profile. Finally, low-field electrical permittivity of the homogeneous samples was used to adjust and verify the validity of the simple phase mixture rule for the bi-layers electrical permittivity. (3) The properties of the homogeneous samples are in agreement with what is reported by other authors. Bi-layers samples present properties values between the ones obtained for its homogeneous constituents. When sintered for long periods, the interface thickness between the phases broadens, leading to a region with graded  $Zr^{+4}$  concentrations and the electrical permittivity departs from the predicted by the simple phase mixture rule. Nevertheless, when sintered in short periods, the samples retain identity of each constituent, the interface thickness is negligible and the predictions of the simple phase mixture rule were in great agreement with the measurements, suggesting that the behavior on temperature of some properties can be tuned, allowing designed  $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$  heterostructures for specific applications.

**Keywords:** Ferroelectric. Heterostructures. Modified  $BaTiO_3$ .

#### Referências:

- 1 BELL, A. J. Ferroelectrics: the role of ceramic science and engineering. **Journal of the European Ceramic Society**, v. 28, n. 7, p. 1307-1317, 2008.
- 2 MAITI, T.; GUO, R.; BHALLA, A. S. Evaluation of experimental resume of  $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$  with



perspective to ferroelectric relaxor family: an overview. **Ferroelectrics**, v. 425, n. 1, p. 4-26, 2011.

3 NEWNHAM, R. E. Composite electroceramics. **Ferroelectrics**, v. 68, n. 1, p.1-32, 1986.

## PG6

### Massa fotovoltaica de heterojunção orgânica

AMORIM, D. R. B.<sup>1</sup>; FARIA, R. M.<sup>1</sup>

danirba@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Dispositivos fotovoltaicos orgânicos surgem como uma tecnologia promissora para a conversão direta da energia solar em eletricidade.(1) Eles são formados por um filme ativo bifásico complexo, que é compensado por um simples eletrodo de estrutura planar (buraco na camada de transporte-camada-eletrodo ativo ).(1-2). Como camada de transporte de buraco, o polímero mais utilizado é o poli (3,4-etilenodioxitiofeno) poli (estirenosulfonato)(PEDOT: PSS). A camada ativa é, em geral, aleatória, mas uniforme, bifásica composta por um polímero fotoativo e um material altamente eletronegativo. Até agora, a camada ativa de maior sucesso é uma mistura composta por poli (3-hexiltiofeno) (P3HT) (como doador) com éster metílico do ácido C61-fenil-butírico (PCBM) (como aceitador). Este dispositivo de múltiplas camadas é conhecido como massa fotovoltaica de heterojunção orgânica (BHJ-OPV).(1-2) Um BHJ-VOP, que tem o óxido de índio estanho (ITO), como eletrodo transparente e de alumínio (ou de alumínio- cálcio), como eletrodo traseiro. No meu projeto de doutorado, pretende-se otimizar o desempenho do BHJ-OPV produzido no Grupo de Polímeros Bernhard Gross, mudando os materiais que compõem a camada ativa. Derivados de poli uoreno são fortes candidatos como materiais dedoadores (2-3), enquanto que para aceitante, vamos tentar o (6,6)éster metílico de ácido C71-butírico-fenil (PCBM-C71). Palavras chaves: Polimeros, Poli uoreno , Fotovoltaico

**Palavras-chave:** Polimeros. Poli

uoreno . Foptovoltaico.

#### Referências:

1 DUNLOP, J. P. **Photovoltaic systems**. 2nd ed. Orland Park: American Technical Publishers, c2010. 469 p.

2 VAMVOUNIS, G. **Synthesis, photo-and eletro-optical properties of luminescent conjugated polymers**. 2004. Ph. D. Thesis (Chemistry) - Department of Chemistry, Simon Fraser University, Canada, 2004.

3 RONCALI, J. Conjugated poly(thiophenes): synthesis, functionalization and applications. **Chemical Review**, v. 92, n. 4, p. 711-738, 1992.

## PG7

### **Estratégias para combinação da radiação ionizante e terapia fotodinâmica para tratamento de tumores**

ANDRADE, C. T.<sup>1</sup>; PIRES, L.<sup>1</sup>; PAVONI, J. F.<sup>2</sup>; BAFFA FILHO, O.<sup>2</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

cintya\_teles@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

A terapia fotodinâmica (TFD) é uma técnica amplamente utilizada no tratamento de diversas doenças. Ela emprega uma substância fotossensível, luz e o oxigênio molecular para induzir a morte de células neoplásicas. Uma das limitações da TFD é a baixa penetração da luz visível em tecidos biológicos.(1) A radioterapia é uma técnica que utiliza radiação ionizante para tratamento de tumores, apresentando como limitação os efeitos colaterais.(2) O Objetivo desse projeto é avaliar a eficiência de duas estratégias para aumentar o volume de tecido tratado com terapia fotodinâmica. A primeira estratégia é utilizar a associação de um material cintilador excitado com raios-X e que emite luminescência na região do visível. A segunda estratégia é o uso combinado da radioterapia e terapia fotodinâmica. Para essa segunda parte, ratos Wistar serão submetidos a diferentes protocolos de tratamento que incluem TFD em tecido previamente irradiado, radioterapia em tecido previamente tratado por TFD, radioterapia e TFD. Uma análise clínica avaliará macroscopicamente os danos teciduais. Imagens de fluorescência serão feitas para avaliar a formação e degradação da PpIX bem como fluorescência da pele. A análise por imagem de refletância fará uma avaliação da distribuição vascular. Por fim, um estudo histopatológico será feito para a avaliação do dano tecidual através da contagem de células mortas e inflamatórias, bem como a análise da cicatrização. Os materiais cintiladores e radiosensíveis serão primeiramente analisados em cultura de células metastáticas de câncer de mama (MDAMB231), onde será avaliada a sua citotoxicidade no escuro e o seu poder de aumentar o volume de tecido tratado. O teste com os animais está aguardando aprovação do comitê de ética. Uma colaboração científica com a universidade federal de Sergipe fornecerá os cintiladores para serem testados, pois eles precisam emitir em comprimentos de onda específicos que coincidam com a absorção dos fotossensibilizadores que serão estudados, clorina e porfirina, além de não apresentarem citotoxicidade celular. O laranja de acridina (AO, do inglês acridine orange) é o material utilizado como radiosensibilizador, os primeiros testes mostraram que ele penetra na célula e apresenta baixa toxicidade no escuro. Os próximos passos para esta etapa consistem em irradiar as células com 1, 3, 5 e 7 Gy e diferentes concentrações de AO para avaliar o dano celular e comparar com o grupo controle (somente irradiação). Resultados parciais utilizando AO em cultura de célula de melanoma murino (B16F10) com irradiação de 10, 30, 50 e 70 cGy mostraram que a dose entregue foi muito baixa, não causando dano significativo às células. Além de selecionar as doses, os resultados também serviram para eleger as concentrações de AO a serem inicialmente testadas nas células MDAMB231, essas concentrações serão de 10, 40, 70 e 100  $\mu\text{g/mL}$ , pois concentrações muito maiores do que essas apresentam significativa citotoxicidade celular. Esse estudo é muito importante, pois a associação dessas duas técnicas foi pouco estudada até o momento e poderia aumentar o dano causado ao tecido enquanto

diminui os efeitos colaterais provenientes da radioterapia.(3)

**Palavras-chave:** Radioterapia. Terapia fotodinâmica. Câncer de mama.

**Referências:**

- 1 POTTLE, R.; KRAMMER, B.; BAUMGARTNER, R.; STEPP, H. **Photodynamic therapy with ALA: a clinical handbook**. Cambridge: RCS Publishing, 2006.
- 2 MUNIZ, R.M. **Os significados da experiência da radioterapia oncológica na visão de pacientes e familiares cuidadores**. 2008. 243 f. Tese (Doutorado em Enfermagem Fundamental) - Escola de Enfermagem de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2008.
- 3 NAKANO, A.; WATANABE, D.; AKITA, Y.; KAWAMURA, T.; TAMADA, Y.; MATSUMOTO, Y. Treatment efficiency of combining photodynamic therapy and ionizing radiation for Bowen's disease. **Journal of the European Academy of Dermatology and Venereology**, v. 25, n.4, p. 75-478, 2011.

## PG8

# Desenvolvimento de técnicas de processamento de dados e simulações aplicado ao estudo de meios porosos por Ressonância Magnética Nuclear.

ANDREETA, M. B.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

mariane.andreeta@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) tem se mostrado essenciais na caracterização de meios porosos. (1) Através de medidas de parâmetros físicos (como os coeficientes de difusão e tempos de relaxação longitudinal (T1) e transversal (T2) de fluidos confinados nos poros, os quais têm suas propriedades alteradas pela interação com as paredes do material sólido que o envolve, é possível extrair informação sobre a permeabilidade e tamanho dos poros do material. Desta forma, as técnicas de RMN possibilitam identificar sutilezas nas estruturas destes materiais. Com o desenvolvimento das técnicas experimentais, no entanto, surge a necessidade do acompanhamento das técnicas computacionais que colaboram para a interpretação dos dados e entendimento das dinâmicas experimentais. Neste projeto, visa-se o desenvolvimento de ferramentas que permitem correlacionar estas informações extraídas através da técnica de RMN; tanto sobre a dinâmica molecular dos fluidos, assim como parâmetros sobre a estrutura físico-química dos poros e dos próprios fluidos que os permeiam, através de uma revisão de técnicas conhecidas como algoritmos da transformada inversa de Laplace (2) para a análise de correlação N-dimensionais dos parâmetros físicos previamente mencionados. Além disso, é proposta a reconstrução do meio poroso em uma rede de conexões, que possibilita caracterizar a estrutura macroscópica do meio e melhor compreender a dinâmica experimental das técnicas de RMN.

**Palavras-chave:** Meios porosos. RMN. Redes complexas.

### Referências:

- 1 DUNN, K.J.; BERGAMN, D. J.; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance:** petrophysical and logging applications. Amsterdam: Elsevier, 2002.
- 2 VENKATARAMANAN, L.; SONG Y.; HURLIMANN M.D. Solving Fredholm integrals of the first kind with tensor product structure in 2 and 2.5 dimensions. **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 50, n. 5, p. 1017-1026, 2002.

## PG9

# Effect of the latitude on the measurement of the UHECR spectrum

ANJOS, R. A.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

rita@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Ultra high energy cosmic rays (UHECR) consist of relativistic charged particles with energies above  $10^{18}$  eV. The nature and origin of these particles have been focus of various studies. They propagate through the universe and are deflected by magnetic fields. Moreover they lose energy interacting with radiation fields, like Cosmic Microwave Background (CMB) and Extragalactic Background Light (EBL). The study of flux and shape of the cosmic rays spectrum can be associated with the UHECR sources and the their chemical composition. In addition to this, the Greisen-Zatsepin-KuzminK (GZK) cutoff of spectrum, photo-pion production process due to the interaction of protons with CMB, can be predicted with more precision. High precision measurements of the Ultra High Energy Cosmic-ray spectrum have been detected by several arrays like the Pierre Auger (1) and Telescope Array (2) Observatories. There are observed differences in the flux of UHECR spectrum these observations, although the spectra have the same shape. It has been shown that the differences in flux can be explained by energy shifts within the estimated systematic uncertainty of each experiment. (3) Also it is known that the position of the experiment can contribute in the measurement of the spectrum. The motivation behind this report is to show the possible contribution of latitude of the experiment in flux of UHECR spectrum and to quantify this difference. Given a source distribution, each latitude on Earth offers an unique observational time. We used the catalogue of quasars and active galactic nuclei from Veron-Cetty and Veron. We propagated protons and iron nuclei from the source in this catalogue to Earth using CRPropa (v.2.0) program and calculated the corresponding measured energy spectrum for several latitudes on Earth. We extend this analysis to the following Observatories located in Southern and Northern hemispheres respectively: Pierre Auger Observatory in Argentina and Telescope Array (TA) Experiment in USA. In conclusion, from the latitude influence and of the distinct sources number we proposed a possible explication to the problem of the difference in the flux of UHECR spectrum of the experiments from Northern and Southern hemispheres.

**Keywords:** Ultra high energy cosmic ray. Energy spectrum. Latitude.

### Referências:

1 ABRAHAM, J. et al. Measurement of the depth of maximum of extensive air showers above  $10^{18}$  eV. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 9, p. 91101-1-91101-7, 2010.

2 IKEDA, D. et al. Hybrid measurements of the telescope array experiment. In: INTERNATIONAL COSMIC RAY CONFERENCE, 31., 2009, Łódź. **Proceedings....** Łódź: University of Łódź, 2009. p. 1-3.





SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

3 DAWSON, B. R. et al. The energy spectrum of cosmic rays at the highest energies. **EPJ Web of Conferences**, v. 53, p. 01005-1-01005-15, 2013. doi:10.1051/epjconf/20135301005.

## PG10

### Prospecção de linhagens bacterianas produtoras de surfactantes em reservatórios de petróleo

ARGENTIN, M. N.<sup>1</sup>; BOSSOLAN, N. R. S.<sup>1</sup>

marcela.argentin@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Nas últimas décadas, os biossurfactantes têm atraído considerável atenção científica devido à sua alta biodegradabilidade, baixa toxicidade, atividade em extremos de temperatura, pH e salinidade e possibilidade de sua produção através da fermentação de resíduos da agroindústria. Banat e colaboradores (1), em uma revisão feita sobre as potenciais aplicações comerciais dos biossurfactantes, indicam a indústria do petróleo como o principal mercado para estes compostos, que podem ser utilizados em processos de recuperação avançada de petróleo que utilizam microrganismos (MEOR) e de biorremediação de hidrocarbonetos. No caso particular da técnica de MEOR, os microrganismos nos reservatórios são estimulados a produzir surfactantes, que ajudam na redução da tensão interfacial na interface óleo/rocha. Isso reduz as forças capilares que impedem o óleo de se mover através dos poros da rocha. Biossurfactantes também podem atuar na emulsificação do petróleo, auxiliando na separação dos filmes de óleo aderidos às rochas. Neste contexto, o presente projeto propõe como objetivo geral a prospecção e identificação de linhagens bacterianas produtoras de surfactantes oriundas de amostras de rocha de reservatórios de petróleo, com salinidade e temperatura elevadas, a partir de cultivos enriquecidos em condições de aerobiose e anaerobiose. A prospecção de bactérias produtoras de biossurfactantes será feita, inicialmente, a partir dos cultivos mistos mantidos nos laboratórios do Grupo de Biofísica Molecular. Estes foram iniciados a partir de rochas coletadas em profundidade de cerca de 3.000 metros de um reservatório offshore localizado na região sudeste do Brasil. As amostras foram inoculadas à temperatura de 55°C e 80°C em meios de cultura enriquecidos que favorecem o crescimento bacteriano, meio LB para cultivo de bactérias aeróbias e meio BANHT para cultivo das anaeróbias, com salinidade ajustada em 35, 70 e 120 g/L de NaCl. O isolamento será feito em meio sólido após a constatação do crescimento bacteriano nos cultivos líquidos. As colônias isoladas serão cultivadas em meios formulados para favorecer a produção de biossurfactantes, como por exemplo, o Meio E. (2) Os métodos do colapso da gota e de emulsificação serão utilizados para a verificação da produção de substâncias tensoativas nos cultivos dos isolados bacterianos. A partir do trabalho proposto, espera-se padronizar os cultivos em aerobiose e anaerobiose para a recuperação das linhagens de bactérias produtoras de biossurfactantes a partir de ambientes extremos, bem como a seleção, isolamento e manutenção destas linhagens. Além disso, busca-se a identificação das espécies bacterianas recuperadas nos cultivos positivos para a produção de biossurfactantes.

**Palavras-chave:** Biossurfactantes. Bactérias. Petróleo.

#### Referências:

1 BANAT, I. M.; MAKKAR, R. S.; CAMEOTRA, S. S. Potential commercial applications of microbial

surfactants. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 53, n. 5, p. 495-508, May 2000.

2 CLARK, J. B.; MUNNECKE, D. M.; JENNEMAN, G. E. In situ microbial enhancement of oil recovery. **Development Industrial Microbiology**, v. 22, p. 695-701, 1981.

## PG11

### New zero-field NMR and NQR experiments for studying materials and quantum information processing

ASCONA, C. R.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

crivera@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Zero-field Nuclear Magnetic Resonance (NMRz) and Nuclear Quadrupole Resonance (NQR) are techniques that offer important information about nuclear environments, having the advantage of being sensitive to the internal magnetic fields and the electric field gradients (EFG), without the need of using strong static external fields. In the case of NMRz, used for studying magnetic materials, the spectra result from strong Zeeman coupling interaction perturbed by a quadrupolar interaction. Using two arbitrary radio-frequency (RF) pulses, it is possible to observe multiple-quantum (MQ) echoes. To explain such behavior, it was proposed a model in which the magnetic sample presents both Zeeman and quadrupolar coupling inhomogeneity distributions. Our experiments show that the magnetic materials have two different regions where: (i) the Zeeman coupling distribution larger than quadrupolar one, and (ii) the magnitude of both distributions are similar. Under these two dispersion conditions in magnetic materials, it was possible to observe one n-MQ echo for each coherence of n order. To observe individually each echo and better explore the physical information contained in each signal, MQ coherence selection was performed by applying specific phase cyclings and time-averaging. These methods offered complementary physical information about the nuclear spin interactions and the magnetic materials properties. In the case of NQR, the quadrupolar interaction is the most intense. A weak external static magnetic field is applied just to remove the nuclear quadrupolar states degeneracy. The transition frequencies depend on the relative orientation of the weak external static magnetic field with the main axis of the EFG. This feature allows performing some new designed experiments under special spectral conditions. Our main goal in this case is to employ NQR for performing quantum information experiments, being the first steps the creation of pseudopure quantum states and logic gates.

**Keywords:** Zero-field NMR. Magnetic materials. NQR.

#### Referências:

- 1 TOZONI, J.R.; TELES, J. ; AUCCAISE, R.; OLIVEIRA-SILVA, R.; RIVERA-ASCONA, C.; VIDOTO, E.L.G. ; GUIMARÃES, A.P.; OLIVEIRA, I.S.; BONAGAMBA, T.J. Multi-quantum echoes in GdAl<sub>2</sub> zero-field high-resolution NMR. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 212, n.2, p. 265-273, Oct. 2011.
- 2 BODENHAUSEN, G.; KOGLER, H.; ERNST, R.R. Selection of coherence-transfer pathways in NMR pulse experiments. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 58, n. 3, p. 370-389, 1984.
- 3 TELES, J.; DeAZEVEDO, E.R.; AUCCAISE, R.; SARTHOUR, R.S.; OLIVEIRA, I.S.; BONAGAMBA,



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

T.J. Quantum state tomography for quadrupolar nuclei global rotations of the spin system. **Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 15, p. 154-156, 2007.

## PG12

### Estudo da entropia como metodologia para o reconhecimento de padrões em texturas

ASSIRATI, L.<sup>1</sup>; BRUNO, O. M.<sup>1</sup>

lucasassirati@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho faz um estudo do uso da entropia como ferramenta para o reconhecimento de padrões em texturas. A entropia é um conceito utilizado em termodinâmica para medir o grau de organização de um meio. Entretanto, este conceito pode ser ampliado para outras áreas do conhecimento. A adoção do conceito em Teoria da Informação e, por consequência, em reconhecimento de padrões foi introduzida por Shannon no trabalho intitulado "A Mathematical Theory of Communication", publicado no ano de 1948. (1) Neste mestrado, além da entropia clássica de Boltzman-Gibbs-Shannon, são investigadas a entropia generalizada de Tsallis (2) e suas variantes (análise multi-escala, múltiplo índice  $q$  e seleção de atributos) (3), aplicadas ao reconhecimento de padrões em imagens. Utilizando bases de dados bem conhecidas na literatura, realizou-se estudos comparativos entre as técnicas. Os resultados mostram que a entropia de Tsallis, através dos múltiplos índices  $q$  (3), tem grande vantagem sobre a entropia de Boltzman- Gibbs-Shannon. Uma aplicação deste estudo em imagens de satélite é proposta com o intuito de demonstrar o potencial do método.

**Palavras-chave:** Entropia. Reconhecimento de padrões . Texturas.

#### Referências:

- 1 SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **Bell System Technical Journal**, v. 27, n. 3, p. 379-423, July 1948.
- 2 TSALLIS, C. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics. **Journal of Statistical Physics**, v. 52, n. 1/2, p. 479-487, 1988.
- 3 FABBRI, R.; GONÇALVES, W. N.; LOPES, F. J. P.; BRUNO, O. M. Multi- $q$  pattern analysis: a case study in image classification. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, v. 391, n. 19, p. 4487-4496, Oct. 2012.

## PG13

### Deformações do modelo de Bullough-Dodd

AURICHIO, V. H.<sup>1</sup>; FERREIRA, L. A.<sup>1</sup>

vinicius.aurichio@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

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

**Palavras-chave:** Soliton. Quasi-integrabilidade. Bullough-Dodd.

#### Referências:

1 FERREIRA, L. A.; ZAKRZEWSKI, W. J. The concept of quasi-integrability: a concrete example. **Journal of High Energy Physics**, v.2011, n.5, May 2011. doi: 10.1007/JHEP05(2011)130.

## PG14

### Caracterização molecular e estrutural do Leishmania RNA Virus LRV1-4

AZEVEDO, E. C.<sup>1</sup>; SOUZA, M. M.<sup>2</sup>; PORTUGAL, R. V.<sup>3</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

erikaa.chang@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

<sup>3</sup>Laboratório Nacional de Nanotecnologia - CNPEM

O estudo dos protozoários é relevante por diversos motivos, entre eles sua diversidade, sua importância evolutiva para o surgimento de eucariotos e metazoários e o seu impacto na saúde pública, com diversas espécies parasitas de mamíferos. O *Leishmania* RNA vírus 1-4 (LRV1-4) é um vírus da família *Totiviridae*, de capsídeo icosaédrico que codifica duas proteínas (proteína capsidial e RNA polimerase). (1) Dados recentes indicam o envolvimento do LRV1-4 na patogênese de *Leishmania* no hospedeiro humano (2), tornando seu estudo de fundamental importância para o entendimento dessa doença e de seu papel na relação parasito-hospedeiro. Em esforço anterior não foi possível obter expressão recombinante das duas proteínas virais. Foi portanto estabelecido um novo protocolo de lise celular e purificação do LRV1-4 a partir de *Leishmania guyanensis* com o qual foram obtidas imagens inéditas de Microscopia Eletrônica de Transmissão do capsídeo. (3) Este trabalho objetiva dar continuidade aos trabalhos iniciados com estudos mais aprofundados de Microscopia Eletrônica de Transmissão por Negative Staining e Crio-Microscopia Eletrônica. Os estudos aqui propostos irão permitir a construção de um modelo estrutural do capsídeo do LRV1-4 e, assim, sua identificação correta dentre os *Totiviridae*. Além das contribuições ao conhecimento da biologia/patogenia do LRV1-4 este estudo representa a primeira caracterização estrutural de um capsídeo viral realizada no Brasil e assim um avanço importante para a área de virologia e biologia estrutural no país. Serão apresentados resultados tanto da obtenção do vírus a partir de seu hospedeiro natural (*L. guyanensis*) quanto da expressão heteróloga da proteína capsidial em *L. tarentolae*. Em ambos os casos, a obtenção das amostras será possível através da lise celular seguida da purificação por ultracentrifugação e cromatografia de exclusão molecular em coluna Sephacryl 500 (GE). O grau de pureza e a correta montagem do capsídeo serão analisados através das micrografias obtidas em colaboração com o LNNano (CNPEM) para posterior início das análises em condições crio para a obtenção de mais alta resolução.

**Palavras-chave:** LRV. Leishmanivirus. Crio-microscopia.

#### Referências:

1 TARR, P. I.; ALINE, R. F.; SMILEY, B. L.; SCHOLLER, J.; KEITHLY, J.; STUART, K. LR1: a candidate RNA virus of *Leishmania*. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 85, n. 24, p. 9572-9575, 1988.



2 IVES, A. et al. Leishmania RNA virus controls the severity of mucocutaneous Leishmaniasis. **Science**, v. 331, n. 6018, p. 775-778, 2011.

3 SOUZA, M. M.; MANZINE, L. R.; SILVA, M. V. G.; PORTUGAL, R. V. ; BETTINI, J.; CRUZ, A. K.; ARRUDA, E.; THIEMANN, O. H. Application of a novel purification procedure for Leishmania RNA virus (LRV). **Journal of Virological Methods**, 2013. Submetido.

## PG15

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

ÁVILA, O. I.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

oriana@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Microfabricação a laser utilizando polimerização de 2 fótons é uma técnica muito interessante para a fabricação de sistemas de distribuição de medicamentos, suportes para engenharia de tecidos e implantes médicos com uma maior variedade de tamanhos, formas e materiais, do que anteriormente demonstrado com outras técnicas de microfabricação. (1) Neste trabalho, propomos usar um laser pulsado de femtossegundos para fabricar micro-ambientes e, investigar crescimento e diferenciação celular através da fotopolimerização via absorção de dois fótons. A fotopolimerização induzida por absorção de 2 fótons será realizada utilizando um oscilador laser de Ti : safira que produz pulsos de 130 fs em 800nm. Neste sistema, a amostra é varrida no plano xy pelo feixe laser através de um conjunto de espelhos galvanométricos. O movimento na direção z será realizado por um estágio de translação. O feixe laser será focalizado na amostra utilizando uma objetiva de abertura numérica 0.65. As microestruturas produzidas por este método nos dará maior compreensão uma estudo sistemático dos processos celulares e testes para engenharia de tecidos.

**Palavras-chave:** Microfabricação. Fotopolimerização. Microambientes.

#### Referências:

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

## PG16

### Análise de redes complexas por meio do passeios aleatórios

BAGNATO, G. G.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>

gui.bagnato@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de redes complexas é um tema interdisciplinar que abrange diversas áreas de conhecimento, tais como ciência da computação, matemática, física, biologia e sociologia. O termo rede complexa refere-se a um conjunto de vértices (nós) que são interligados por meio de arestas. Uma vez determinadas as regras de ligações entre os elementos, este sistema complexo é caracterizado e modelado matematicamente através da teoria de grafos. Os primeiros trabalhos foram desenvolvidos em meados de 1930, quando sociólogos utilizavam essas redes com finalidade de estudar o comportamento da sociedade e a relação entre os indivíduos. As redes sociais eram constituídas por pessoas, representadas por vértices, e pelas interações entre eles, as arestas. As informações extraídas deste sistema eram usadas para determinar os indivíduos que melhor se relacionavam com os demais ou para identificar os mais influentes. Com o avanço da tecnologia de informação e a disponibilidade de computadores que permitem análises de dados em grande quantidade, houve uma mudança significativa na área. As pesquisas começaram a considerar propriedades estatísticas em larga-escala, envolvendo milhões ou bilhões de vértices, em contraste com as dezenas ou centenas de nós usados em pesquisas anteriores. As redes complexas são frequentemente estudadas por meio de análise de suas propriedades estruturais ou dinâmicas. A estrutura está relacionada à maneira como as conexões organizam-se entre os vértices da rede, como por exemplo o efeito de pequeno mundo e a distribuição de graus seguindo uma lei de potências. Por outro lado, a dinâmica é baseada em processos dependentes do tempo, como transporte e sincronização. O entendimento da relação entre estrutura e dinâmica é de grande importância nos princípios de organização das redes complexas. Neste sentido, diversos trabalhos estão sendo realizados, como o estudo da relação do fluxo do passeio aleatório com a estrutura de comunidades. (1) O passeio aleatório é um processo estocástico utilizado para modelar a dinâmica das redes complexas (2) Matematicamente, ele é descrito por uma cadeia de Markov que evolui temporalmente através da equação mestra. Nos últimos anos, o estudo da dinâmica de redes através do passeio aleatório vem sendo utilizado para criação de algoritmos de busca nos diversos tipos de redes (3), assim como tem auxiliado o entendimento do transporte de informação. Este trabalho de doutorado tem como objetivo caracterizar redes complexas reais e seus modelos teóricos através do passeio aleatório. As análises serão feitas a partir de simulações numéricas utilizadas para buscar relações entre as atividades de caminhadas aleatórias e características estruturais da rede e seus efeitos no comportamento dinâmico.

**Palavras-chave:** Redes Complexas. Passeio Aleatório. Sistemas dinâmicos.

#### Referências:

1 ROSVALL, M.; BERGSTROM, C. T. Maps of random walks on complex networks reveal community structure. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**,

v. 105, n. 4, p. 1118-1123, Jan. 2008.

2 COSTA, L. F.; TRAVIESO, G. Exploring complex networks through random walks. **Physical Review E**, v. 75, n. 1, p. 016102-1-016102-7, Jan. 2007.

3 YANG, S. J. Exploring complex networks by walking on them. **Physical Review E**, v. 71, n. 1, p. 016107-1-016107-5, Jan. 2005 .

## PG17

# Develop of an optical imaging system for Bose-Einstein Condensate tomography

BAHRAMI, A.<sup>1</sup>; HENN, E. A. L.<sup>1</sup>

usabasalt@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

This project is a master thesis at Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Brazil. The main objective of the project is trying to design, test and also implement a new Fluorescence imaging system that will be used for further studying of an ultracold gas of  $^{87}\text{Rb}$  atoms. Bose-Einstein Condensation (BEC) is a phase transition which became possible after discovery and great advancement on Laser cooling and also magnetic trapping (1). Since 2007, our group at Universidade de São Paulo is working on cooling of  $^{87}\text{Rb}$  atoms down to hundreds of nK above the absolute zero and trying to generate Quantum Turbulence (2). In fact, we produce a BEC of  $^{87}\text{Rb}$  containing almost 2 times  $10^5$  atoms with a small thermal fraction in a cigarshaped magnetic trap. Once the condensate is obtained, we apply an oscillating magnetic field using a pair of anti-Helmholtz coil. The next crucial step in order to extracting almost all information from the experiment, can be done using imaging of BEC. Absorption and Fluorescence imaging use a probe beam tuned close to a strong resonance in the atoms or molecules, while a second class of imaging methods make use of an off resonant probe beam to detect the interaction by the phase-shift acquired in transmission through atomic sample. Each imaging method exhibits different signal-to-noise ratio (SNR) while each technique has its own advantages and disadvantages. The most common method of observation of the atomic clouds is absorption imaging of the atoms distribution. Illumination of atoms with a probe beam of near resonant light allows us to image shadows of the atomic cloud onto a CCD camera. Through absorption images we can calculate important properties of the cloud, such as optical density and atom number. It needs to develop a new Fluorescence imaging system in our experiment. Indeed, to reveal a 3D image we need to have symmetry in our cloud but this symmetry does not exist, so using Fluorescence imaging technique will give us a good chance of getting a 3D density profile to reveal vortex distribution on QT and further studying. Since our imaging system in this project is based on Time-of-Fight (TOF) (3), we let the BEC to release from the Magnetic trap and undergo a free fall due to the gravitational force. This imaging process would be implemented as (A) setting up an optical system for generating a cylindrical probe beam (B) using a couple of Piezoelectric Transducers (PZTs) in order to steer produced sheets of probe beam with time interval less than 1ms (C) collecting scattered light of atoms on CCD camera (D) retrieving a 3D image of BEC using theses 2D images. Since we have optically dense atoms, then the most likely hardship that our experiment will encounter, would be re-absorption of scattered light that can affect our final image.

**Keywords:** Bose-Einstein condensation. Quantum turbulence. Absorption imaging.

### Referências:

1 METCALF, H. J.; STRATEN, P. V. Laser cooling and trapping of atoms. **Journal of the Optical**

**Society of America B**, v. 20, n. 5, p. 887-908, 2003.

2 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301, 2009.

3 LETT, P. D.; WATTS, R. N.; WESTBROOK, C. I.; PHILLIPS, W. D. Observation of atoms laser cooled below the Doppler limit. **Physical Review Letters**, v. 61, n. 2, p. 169-172, 1988.

## PG18

### Polymeric nanofibers for nanomedicine applications.

BALLESTEROS, C. A. S.<sup>1</sup>; CORREA, D. S.<sup>2</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

carturosuarez@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Embrapa Instrumentação - CNPDIA

Polymeric nanofibers have played a fundamental role in tissue regeneration (1). The nanofibers are synthesized mainly via the electrospinning technique, due its technical simplicity and possibility of obtaining fibers with excellent mechanical and morphological properties. Nanofibers can be biodegradable and biocompatible depending on the type of polymer employed (2). Recently, a number of research groups have concentrated efforts to improve the bioactivity of nanofibers by means of functionalization with biocomposites and nanomaterials (3). Poly( $\alpha$ -ester) caprolactone (PCL) is a biocompatible and degradable polymer that exhibit interesting characteristics for biological applications. However, its usefulness in applications in tissue regeneration is limited by a low bioactivity. The main goal of this Ph.D. project is the synthesis, functionalization and characterization of polycaprolactone nanofibers with amphiphilic peptides, growth factors and nanoparticles, aiming at producing systems with high stability and well defined properties. Emphasis will be given to the understanding of the physico-chemical, thermal and biodegradable properties of the nanofibers using spectroscopic, microscopic and calorimetric techniques. Moreover, these nanocomposites will be tested in vitro to evaluate the cellular toxicity and capability of the fibers to interact with specific cells cultures.

**Keywords:** Nanofibers. Nanomedicine. Nanoparticles.

#### Referências:

- 1 SAHOO, S. et al. Growth factor delivery through electrospun nanofibers in scaffolds for tissue engineering applications. **Journal of Biomedical Materials Research A**, v. 93, n.4, p.1539-155, 2010. doi: 10.1002/jbm.a.32645.
- 2 KIM, C. H. et al. An improved hydrophilicity via electrospinning for enhanced cell attachment and proliferation. **Journal of Biomedical Materials Research B**, v. 78, n.2, p. 283-290, Aug.2006.
- 3 JUN, H.W. et al. Enzyme-mediated degradation of peptide-amphiphile nanofiber networks. **Advanced Materials**, v. 17, n.21, p. 2612-2617, Nov. 2005.

## PG19

### Contribution of self-focusing and Fresnel reflection effects in the third-harmonic generation at interfaces

BARBANO, E. C.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>; ZÍLIO, S. C.<sup>1</sup>; MISOGUTI, L.<sup>1</sup>

emerson.barbano@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The third-harmonic generation (THG) is a nonlinear optical phenomenon well known and well reported in the literature. It is used for third-order nonlinear optical susceptibility determination and for nonlinear optical microscopy, for example. When we work in a regime where the laser beam Rayleigh range is thinner than sample thickness, thick sample condition, we can observe that the THG occurs only at materials interfaces. (1) This effect can be understood by taking into account the Gouy phase shift of the focused beam. Here, what we observed is that the third-harmonic generated in the material input interface is stronger than one generated in the output interface. This interface dependence asymmetry, although observed by others researchers, was never been completely explained before. In this work we present our proposal to explain this intensity pattern by considering the self-focusing effect and the Fresnel reflection. The self focusing effect reduces the beam waist in the output interface and, consequently, increases the beam irradiance, and the Fresnel reflection acts as a small factor changing the beam irradiance due to constructive and destructive interferences at output and input interfaces, respectively. Both effects increase the THG on the materials output interfaces and they can be traced by playing with materials linear and nonlinear index of refraction. We did measurements on several commercial optical glasses such as silica, BK7, K10, SK11, F14 and F2 and also in different cuvettes (silica e B270) filled with different solvents: acetone, chloroform, dimethyl sulfoxide (DMSO) and toluene, with the purpose to verify how linear and nonlinear indices of refraction are related to the THG signal. As excitation source we have used a 1300 nm ultrashort pulses from an optical parametric amplifier pumped by a 150 fs, 1 kHz, laser pulse from a Ti:sapphire laser system (CPA-2001, Clark-MXR).

**Keywords:** Third-harmonic generation. Self-focusing. Fresnel reflection.

#### Referências:

1 BARBANO, E. C.; SIQUEIRA, J. P.; MENDONÇA, C. R.; MISOGUTI, L.; ZILIO, S. C. Broadband third-harmonic generation on interfaces using femtosecond pulses. **Proceedings of SPIE**, v. 7917, p. 79170T-1-79170T-4, 2011.



## PG20

# Photoluminescence of radial periodic and doped heterostructured GaAs/AlGaAs nanowires

BARBOSA, B. G.<sup>1</sup>; PUSEP, Y. A.<sup>1</sup>

brennoglob@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Semiconductor nanowires have come into sight in these last decades due to its promising applicability in many kinds of electronic and optoelectronic devices (1). Along the methods to characterize semiconductors we use photoluminescence which is a powerful tool to study optoelectronic properties of these materials. Two peaks of photoluminescence were found in the Core/Inner Shell/Outer Shell heterostructured GaAs/AlGaAs/GaAs nanowire (2). One of these peaks came from the electron-hole recombination in the core, while the other peak was due to a tunneling assisted indirect recombination between the outer-shell and the core. In this work we have studied the doped Core/Inner Shell/Outer Shell GaAs/AlGaAs/GaAs nanowires. The photoluminescence observed in these nanowires reveal a clear evidence of formation of the Fermi surface. We found that the doping resulted in significant suppression of the tunneling assisted recombination. Moreover, the heterostructured nanowires with a complicated periodic shell structure (radial GaAs/AlGaAs superlattice) were explored. In these structures we observed an additional photoluminescence peak due to a direct recombination between quantum wells in the superlattice. An energy position of this additional photoluminescence peak allowed us to determine width of the wells of the radial superlattice. Results of our study are important in application of the heterostructured nanowires in optoelectronics and photovoltaics. It demonstrates a possibility to tailor a characteristic energy range where the nanowires can be used. *Acknowledgement* The authors thank support from FAPESP.

**Keywords:** Heterostructured nanowires. Gallium arsenide. Aluminium Gallium Arsenide.

### Referências:

1 LI, Y.; QIAN, F.; XIANG, J.; LIEBER, C. M. Nanowire electronic and optoelectronic devices.

**Materials Today**, v. 9, n. 10, p.18-27, 2006.

2 CAFACE, R. A.; GUIMARAES, F. E. G.; ARAKAKI, H.; SOUZA, C. A.; PUSEP, Y. A.

Photoluminescence of radial heterostructured GaAs/AlGaAs/GaAs nanowires . **Journal of Applied Physics**, v. 113, n. 6, p. 064315, 2013.

## PG21

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

BARDIVIESSO, L. G.<sup>1</sup>; MARTINS, J. M.<sup>1</sup>; BOSSOLAN, N. R. S.<sup>1</sup>

bardiviezzo@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Bactérias do gênero *Petrotoga*, pertencentes à ordem *Thermotogales*, se desenvolvem anaerobicamente em reservatórios de petróleo, sendo nativas destes ambientes extremos no que se refere à temperatura, pressão e salinidade. (1) Estas bactérias são termofílicas e apresentam uma estrutura característica envolvendo a célula, chamada toga. Dentre as seis espécies descritas neste gênero, a maioria produz enzimas que degradam diversas fontes de carbono, como arabinose, celobiose, galactose, xilana, xilose (2), que são carboidratos abundantes na natureza. O presente trabalho tem como objetivo isolar morfotipos a partir de amostras de dois reservatórios de petróleo terrestres na região do recôncavo Baiano, por meio de recuperação em cultivos líquidos e técnicas de semeadura em cultivos sólidos, ambos em anaerobiose. Após o isolamento, ocorrerá a identificação molecular e acompanhamento da curva de crescimento dos isolados, frente a diferentes variáveis como temperatura, salinidade, pH, oxigenação, e degradação de fontes de carbono. Duas espécies do gênero *Petrotoga*, já descritas na literatura, *Petrotoga mobilis* (DSM-10674) e *Petrotoga mexicana* (DSM-14811), serão utilizadas como parâmetros para o estudo de algumas variáveis. Na primeira etapa deste projeto foram feitos testes para seleção de um ou mais meios de cultivo adequados ao isolamento deste gênero. Foram escolhidos dois meios: meio P. mexicana e meio P. olearia, fazendo a correção da salinidade e da temperatura de incubação correspondente ao reservatório, assim como a padronização e refinamento do cultivo e manutenção dos isolados obtidos. A identificação dos isolados foi feita por técnicas de amplificação do DNAr16S, utilizando os primers B27f e U1492r, e sequenciamento, utilizando os primers M13f e M13r. As sequências recuperadas nos clones foram analisadas quanto à qualidade utilizando o software ChromasPro, e comparadas na plataforma virtual BLASTn. As sequências mostraram identidade de 98% a 100% com as espécies *Petrotoga miotherma*, *Petrotoga halophila*, *Petrotoga mobilis* e *Petrotoga olearia*. Para a próxima fase do trabalho, serão feitas: as curvas de crescimento de dois isolados, um de cada reservatório, e a identificação confirmatória por um laboratório especializado; testes da influência das variáveis temperatura, salinidade, pH e oxigenação, no desenvolvimento, assim como a resistência a antibióticos, após determinação das condições ótimas de cultivo; técnica de coloração diferencial de Gram. A degradação de fontes de carbono será aferida por dois testes, um sendo o teste de Cup Plate, feito em placas de Petri com Agar-soft (0,8%), acrescido da fonte de carbono; a atividade poderá ser visualizada após um período de incubação pela coloração de Vermelho-Congo, sendo este um método qualitativo para uma primeira triagem das colônias de interesse. Outro teste seria o ensaio colorimétrico para a quantificação dos açúcares redutores com reagente DNS (ácido 3,5-dinitrossalicílico) (3), cuja padronização já foi feita neste trabalho. Ambos os ensaios de atividade enzimática serão feitos com os extratos referentes à porção pellet (células lisadas e não lisadas) e sobrenadante dos meios de cultura padronizados, contendo a fonte de carbono. Este estudo pretende

contribuir para a padronização das técnicas de isolamento, seleção e cultivo de bactérias termofílicas produtoras de enzimas de interesse industrial, a partir de amostras de reservatórios nacionais.

**Palavras-chave:** Petróleo. *Petrotoga*. Enzimas termoestáveis.

#### **Referências:**

- 1 MAGOT, M.; BERNARD, O.; PATEL, B. K. C. Microbiology of petroleum reservoirs. **Antonie van Leeuwenhoek**, v. 77, n. 2, p. 103-116, 2000.
- 2 ELIZABETH, M. T.; FARDEAU, M. L.; JOULIAN, C.; MAGOT, M.; THOMAS, P.; THOLOZAN, J. L.; OLIVER, B. *Petrotoga halophila* sp. nov., a thermophilic, moderately halophilic, fermentative bacterium isolated from an offshore oil well in Congo. **International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology**, v. 57, n. 1, p. 40-44, 2007.
- 3 MILLER, G. L. Use of dinitrosalicylic acid reagent for determination of reducing sugar. **Analytical Chemistry**, v. 31, n. 3, p. 426-428, 1959.

## PG22

# Bosonic Josephson Junction and Self-Trapping: A Variational Treatment

BARRETO, D. L.<sup>1</sup>; dos SANTOS, F. E. A<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; MAREGA JUNIOR, E.<sup>1</sup>

diogolbar@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Since its prediction in 1925, Bose-Einstein condensation has been crucial in several physics fields for the understanding of the quantum behavior of matter. In 1986 (1), the possibility of atom transfer between two adjacent potential wells (atomic traps) was theoretically predicted and showed itself similar to the well-known phenomenon of the Josephson Junction in superconductors. After the well-succeeded first Bose-Einstein condensation experiment in 1995, studies on the Macroscopic Quantum Tunneling (now called Bosonic Josephson Junction) were resumed and simulations (2) showed its viability. However, these simulations presented a new non-intuitive stable state of equilibrium for this system, due to the interatomic interaction in the condensate, which is now known as Self-Trapping. In this study, we will solve the Gross-Pitaevskii equation via an analytical variational method (3) for the double-well potential problem. We will present the results of these calculations, some simulation results and an enlightenment of the possible cases where the Self-Trapping appears.

**Keywords:** Self-trapping. Bose-Einstein condensate. Bosonic Josephson junction.

### Referências:

- 1 JAVANAINEN, J. Oscillatory exchange of atoms between traps containing Bose condensates. **Physical Review Letters**, v.57, n. 25, p. 3164-3166, 1986.
- 2 SMERZI, A. et al. Quantum coherent atomic tunneling between two trapped Bose-Einstein condensates. **Physical Review Letters**, v.79, n. 25, p. 4950-4953, 1997.
- 3 PEREZ-GARCIA, V. M. et al. Dynamics of Bose-Einstein condensates: variational solutions of the Gross-Pitaevskii equations. **Physical Review A**, v. 56, n. 2, p. 1424-1432, 1997.

## PG23

### The conformational flexibility of an internal fusion peptide from SARS-CoV spike glycoprotein is modulated by lipid membrane composition

BASSO, L. G. M.<sup>1</sup>; FERNANDES, T. V. A.<sup>2</sup>; LIMA, J. F.<sup>1</sup>; MUNTE, C. E.<sup>1</sup>; CRUSCA JÚNIOR, E.<sup>1</sup>; VICENTE, E. F.<sup>1</sup>; CILLI, E. M.<sup>1</sup>; PASCUTTI, P. G.<sup>2</sup>; COSTA FILHO, A. J.<sup>1</sup>

guilhermemansor@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ

The S2 domain of the spike glycoprotein from SARS-CoV is responsible for driving viral and host cell membrane fusion. An internal fusion peptide (IFP), located near the S2 domain N-terminus, plays a crucial role in the fusion process. (1) Although much information has been obtained in recent years on membrane fusion, many aspects of the molecular mechanism behind virus-host cell membrane fusion are not totally understood yet. In particular, many questions regarding the structure, dynamics, and topology of fusion peptides in lipid membranes still remain to be answered. Here we employed a wide variety of experimental and computational techniques to address these questions from different perspectives. Nuclear magnetic resonance was used to gain insights on the peptide structure. The observation of strong  $dNN(i, i + 1)$  NOEs along with many medium-range  $d\alpha N(i, i + 3)$  NOEs and upfield  $H\alpha$  shifts from random coil values suggests an  $\alpha$ -helical conformation for the peptide in dodecylphosphocholine micelles, which agrees qualitatively well with circular dichroism data. The conformational ensemble of IFP was assessed by a combined generalized simulated annealing (GSA)/molecular dynamics (MD) simulations approach. The minimum-energy conformation obtained from the fully stretched peptide generated by GSA was further refined by long timescale MD in different solutions and force fields. Cluster analysis and free-energy surfaces revealed a conformational promiscuity for IFP:  $\alpha$ -helices,  $\beta$ -strands,  $\beta$ -sheets, and random coil conformations were all visited during the MD trajectories, in agreement with the literature. The distance distribution between the N- and C-termini obtained from MD was also well reproduced by the recovered distance histograms from four-pulse double electron-electron resonance experiments of a double-labeled derivative. The average end-to-end distance was found to be modulated by different membrane mimetic environments. From a different perspective, spin-labeled lipids were used to monitor membrane alterations due to peptide binding. IFP was capable of increasing lipid packing and head group ordering only in the presence of negatively charged lipids. The enhancement of the dipolar interactions in the head group region as well as the lowering of the electrostatic energy may make a significant contribution to the overall reduction in the free energy upon peptide binding. The free energy profile of the peptide insertion and folding into a generalized Born model for the lipid membrane was calculated through a more sophisticated approach that combines potential of mean force umbrella sampling and Hamiltonian replica-exchange MD simulations. We found that IFP spontaneously adsorbs at the membrane-solvent interface in a random conformation and then forms a helical structure. Both the free-energy values and the secondary structure content are modulated by the presence of negatively charged membranes, in agreement with experimental data. The MD results also showed a

water-exposed C-terminal end and a membrane-inserted N-terminus, in accordance with electron spin resonance experiments of both N- and C-terminally single spin labeled analogues. To our knowledge, this is the first report that provides dynamics, structural, and topological information of IFP in model membranes at atomic resolution, which may shed much light on the mechanism by which the peptide folds and inserts into lipid bilayers.

**Keywords:** Fusion peptides. SARS-CoV. Protein-lipid interactions.

#### **Referências:**

1 GUILLÉN, J. et al. Second SARS-CoV S2 glycoprotein internal membrane-active peptide: biophysical characterization and membrane interaction. **Biochemistry**, v. 47, n. 31, p. 8214-8224, 2008.

## PG24

### k.p parameters for wurtzite nitrides from *ab initio* calculations

BASTOS, C. M. O.<sup>1</sup>; FARIA JUNIOR, P. E.<sup>1</sup>; CAMPOS, T.<sup>1</sup>; SIPAHI, G. M.<sup>2</sup>

cmobastos@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP / University at Buffalo - SUNY, USA

*Ab initio* methods, based on the Density Functional Theory (DFT) (1), have been proved to be a reliable approach to calculate the energy levels of electrons in a solid. These energy levels, also known as band structures, play a fundamental role to understand the physics of bulk materials. Although *ab initio* approaches works fine for the bulk case, systems with reduced dimensionality require a large number of atoms, considerably increasing the complexity and computational effort. An alternative approach for confined systems is to couple the k.p method (2) with *ab initio* band structures. In the k.p formalism, the interactions among the different energy bands of a semiconductor are described by parameters in the matrix form of the hamiltonian. These parameters can be extracted from the *ab initio* band structures. In this study, we present a numerical method to obtain k.p parameters from *ab initio* calculations. In order to check our fitting method, we applied it to nitride compounds.

**Keywords:** k.p method. Wurtzite nitrides. k.p parameters.

#### Referências:

1 OHNO, K.; ESFARJANI, K.; KAWAZOE, Y. **Computational materials science**: from *ab initio* to Monte Carlo methods. Berlin: Springer-Verlag, 1999.

2 VOON, L.C.L.Y.; WILLATZEN, M. **The K-p method**: electronic properties of semiconductors. Berlin: Springer-Verlag, 2009.

## PG25

### Biochemical and structural investigation of *Naegleria gruberi* selenophosphate synthetase enzyme.

BELLINI, N. K.<sup>1</sup>; SILVA, I. R.<sup>1</sup>; SILVA, M. T. A. da<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

nataliabellini@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Selenoproteins has been investigated thanks to the discovery of the 21st amino acid, selenocysteine, composed of the chemical element selenium whose metabolic action involves reducing the risk of cancer, increased activity of the immune system and thyroid function beyond prevention of neurological diseases such as Parkinsons and Alzheimers .(1) The search study model is the selenocysteine biosynthesis and incorporation pathway in the non-pathogenic unicellular eukaryote *Naegleria gruberi*. Our laboratory has recently described this pathway in *N. gruberi* and it revealed the presence of a Selenofosfato synthase (SPS), the target protein of this project. Monoselenophosphate (active form of selenium) is produced from adenosine 5'-triphosphate (ATP) and selenide by SPS in Bacteria and eukaryotes.(2) Unlike selenophosphate synthetases from other organisms, from the complete genome of *N. gruberi* strain NEG-M (ATCC 30224), an SPS gene was detected that presents two distinct domains: the C-terminal domain (SPS.D), with high amino acid sequence identity with bacterial SPSs, and the N-terminal domain (SPS.MT), similar to methyltransferases from prokaryotes.(2-3) We intend to investigate each domain separately on the atomic structure and physiological role in the cell. ORFs from SPS.D and SPS.MT domains are already cloned into the expression vector pET-32a and pET-28a (Novagen), respectively, and transformed in *Escherichia coli* BL21 (DE3) strain. Expression tests with both SPS.D and SPS.MT domains and also for SPS full length have been carried out varying IPTG expression inducing time concentration and temperature, followed by solubility tests that evaluated different solubilizing agents. SPS.FL new conditions for expression and purification will be tested and how to SPS.MT bioinformatic studies to characterize the construction and study of sequence has been evaluated and lead to biochemical tests. The results so far have revealed that SPS.D is expressed at 20 C, 8 hours of 0.5 mM IPTG expression induction. The result was purified using an imidazole concentration gradient (10 mM - 500 mM) in a nickel ions affinity resin (HisTrap HP, GE). Soluble fractions were confirmed by Gel Electrophoresis in SDS-PAGE PolyAcrylamide 15%. We will evaluate the molecular mass of construction of SPS *N. gruberi* by size exclusion chromatography and by gel electrophoresis in native conditions. Antiserum for both domains and the full length SPS will be obtained and used in Western-Blot experiments to characterize the expression of SPS in each developmental stage of *N. gruberi*. Our studies may contribute to the understanding of the biosynthesis of selenocysteine and better understanding of the metabolism of primitive eukaryotes.

**Keywords:** Selenophosphate sintetase. *Naegleria gruberi*. Selenocysteine.

#### Referências:

1 RAYMAN, M.P. The importance of selenium to human health. **Lancet**, v. 356, n. 9225, p. 233-241,



2000.

2 FAIM, L.M.; SILVA, I. R.; DIAS, M. V. B.; PEREIRA,, H. M.; BRANDAO-NETO, J. B.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN. O. H. Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of selenophosphate synthetases from *Trypanosoma brucei* and *Leishmania major*. **Acta Crystallographica F**, v. 69, n.8, p.864-867, Aug.2013.

3 FRITZ-LAYLIN, L.K.; PROCHNIK, S.E.; GINGER, M.L.; DACKS, J.B.; CARPENTER, M.L.; FIELD, M.C.; KUO, A.; PAREDEZ A.; CHAPMAN J. PHAM, J.; SHU S.; NEUPANE R.; CIPRIANO M.; MANCUSO J.; TU H.; SALAMOV A., L. The genome of *Naegleria gruberi* Illuminates early Eukaryotic versatility. **Cell**,v.140, n.5, p.631-42, March 2010.

## PG26

### Engenharia de reservatórios térmicos na teoria do laser

BERGOC, I.<sup>1</sup>; MORAES NETO, G. D.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

itaua.bergoc@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A teoria do laser, o processo de amplificação óptica por emissão estimulada da radiação, consiste num dos principais alicerces da Óptica Quântica. Se na teoria do laser a dinâmica incoerente associada à ação do meio ambiente (ou reservatório térmico) desempenha papel central (1), muito do que tem sido recentemente realizado em Óptica Quântica centra-se exatamente no desenvolvimento de procedimentos que inibem a ação (inevitável) do meio ambiente. De fato, nas últimas décadas, sistemas da Óptica Quântica passíveis de significativo controle experimental (como a eletrodinâmica quântica de cavidades e os íons aprisionados) foram largamente requisitados para a investigação dos princípios fundamentais da mecânica quântica e para a implementação do processamento de informação quântica, tarefas que exigem alto grau de coerência. Além da utilização dessas plataformas quânticas nas quais a ação do meio ambiente é, de várias formas, mitigada, apresentou-se também uma ampla variedade de técnicas para o controle da ação do meio ambiente; dentre as quais mencionamos a engenharia de reservatórios (2), o desacoplamento dinâmico, os subespaços livres de decoerência e a utilização de sistemas não-estacionários para o enfraquecimento do acoplamento sistema-meio ambiente. Neste trabalho pretendemos associar a teoria do laser às técnicas de controle da ação do meio ambiente. Com isso pretendemos investigar a possibilidade de manipulação da radiação laser através da utilização dos diferentes protocolos para a engenharia de reservatórios térmicos. Ressaltamos que as técnicas acima mencionadas para o controle da ação do meio ambiente foram até então requisitadas unicamente para a proteção da coerência de estados quânticos. Pretendemos alargar as possibilidades de aplicação destas técnicas revisitando, paradoxalmente, a teoria do laser, na qual a ação do meio ambiente consiste exatamente na pedra angular para a produção de luz coerente.

**Palavras-chave:** Teoria do laser. Engenharia de reservatórios. Coerência quântica.

#### Referências:

- 1 CARMICHAEL, H. **An open system approach to quantum optics**. Berlin: Springer Verlag, 1993.
- 2 POYATOS, J. F.; CIRAC, J. I.; ZOLLER, P. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 23, p. 4728-4731, 1996.

## PG27

### Information on crystalline of sugarcane biomass submitted to a specific pretreatment via solid-state NMR

BERNARDINELLI, O. D.<sup>1</sup>; LIMA, M. A.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>; AZEVEDO, E. R.<sup>1</sup>

oigres.daniel@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Characterization of lignocellulosic biomass to produce multi-products such as ethanol and other biomaterial is challenging due to its structural complexity and heterogeneity. (1-3) However, the knowledge of the chemical structure of lignocellulosic biomass is essential to understand possible modifications in the crystalline and chemical composition of sugarcane bagasse when submitted to specific treatments in order to use this biomass feedstock in ethanol production. (3) Solid state nuclear magnetic resonance (NMR) is known as one of the best tools for evaluating the composition of lignocellulose biomass. (1-3) The primary solid state NMR technique that has been used so far is the routine <sup>13</sup>C cross polarization-magic angle spinning (CP-MAS) technique. Although this technique has markedly advanced our understanding of lignocellulosic biomass, full potential of NMR for characterizing these samples has yet to be realized. Recent technical developments and applications of advanced solid state NMR have revealed the promise deeper insights into structures of lignocellulose biomass. (2,3) CP-MAS NMR spectroscopy and X-ray diffraction (XRD) are commonly used to evaluate the crystallinity index of cellulose. (1) Even though may reported results using these different techniques show certain degree of disagreement, the origin of that is understood as a matter of the specific characteristics of each technique, presenting a good correlations depending on the method chosen to analyzing the NMR and XRD data. In the case of complex biomass, such as sugarcane bagasse, the presence of other components such as lignin and hemicellulose, makes the XRD measurement of the crystallinity index questionable, since it is difficult to separate the amorphous cellulose pattern from that of lignin and amorphous hemicelluloses. This difficult is less severe in NMR, since the spectral analysis allows a better separation between the cellulose signals from the other components, but some signal superposition is still present. Here we introduce a simple and straightforward method to monitor the changes in the crystallinity index of lignocellulose biomass upon chemical and enzymatic treatments. The method consists on removing the lignin and hemicelluloses signal from the <sup>13</sup>C solid-state NMR spectrum by proper spectra subtraction. Using this method, we investigated the modifications in the crystalline and chemical composition of sugarcane bagasse submitted to a two-step treatment, using diluted acid followed by a delignification process with increasing sodium hydroxide concentrations, and enzymatic hydrolyze. The results show that hemicelluloses are degraded using diluted acid, while lignin are degraded diluted acid followed by a delignification process. Two step pretreatment, as well as enzymatic hydrolyze treatment, also indicate increase in crystalline cellulose, showing the preferable removal of amorphous cellulose.

**Keywords:** Solid-state nuclear magnetic resonance. Lignocellulose biomass. Crystallinity index.

**Referências:**

- 1 PARK, S.; JOHNSON, D. K.; ISHIZAWA, C. I.; PARILLA, P. A.; DAVIS, M. F. Measuring the crystallinity index of cellulose by solid state C-13 nuclear magnetic resonance. **Cellulose**, v. 16, n. 4, p. 641-647, 2009.
- 2 LIMA, M. A.; LAVORENTE, G. B.; SILVA, H. K. P.; BRAGATTO, J.; REZENDE, C. A.; BERNARDINELLI, O. D.; AZEVEDO, E. R.; GOMEZ, L. D.; MCQUEEN-MASON, S. J.; LABATE, C. A.; POLIKARPOV, I. Effects of pretreatment on morphology, chemical composition and enzymatic digestibility of eucalyptus bark: a potentially valuable source of fermentable sugars for biofuel production - part 1. **Biotechnology for Biofuels**, v. 6, n. 75, p. 1-17, 2013.
- 3 REZENDE, C. A.; LIMA, M. A.; MAZIERO, P.; AZEVEDO, E. R.; GARCIA, W.; POLIKARPOV, I. Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility. **Biotechnology for Biofuels**, v. 4, n. 54, p. 1-18, 2011.

## PG28

### Desenvolvimento de processos de litografia eletrônica e por feixe de íons para aplicação em nanoplasmonica

BRATIFICH, R.<sup>1</sup>; MAREGA JUNIOR, E.<sup>1</sup>

bratifich@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A busca de micro-circuitos mais integrados com as reduções no consumo de energia e custos de produção sempre motivou a indústria de microeletrônica a reduzir cada vez mais as dimensões dos dispositivos produzidos. As diferentes técnicas de nanofabricação tornaram-se fundamentais na engenharia de novos materiais, uma vez que a produção e estudos das características de tais materiais dependem da geometria envolvida na confecção dos dispositivos. (1) Em paralelo a estes desenvolvimentos, as descobertas nos campos de ótica de campo próximo e confinamento do transporte da luz abaixo do limite de difração resultaram no aparecimento de duas áreas novas de pesquisa a Nanofotônica e a Nanoplasmonica. As pesquisas com plasmons de superfície abriram possibilidades de localização, transporte, reflexão e chaveamento de frequências ópticas (petahertz) abaixo da escala de comprimento de onda da luz visível. Novos conceitos de dispositivos em micro e nano-escala utilizando esta propriedade, integrados com circuitos eletrônicos, mostraram um grande potencial em aplicações tecnológicas nas áreas de comunicação, informação e outros campos da ciência, o que vem dando a este novo tema um caráter multidisciplinar de grande alcance. (3) O objetivo deste trabalho é o de desenvolver técnicas de processamento litográfico (2) aplicadas ao desenvolvimento de nano-antenas para o guiamento de luz, usando de litografia óptica, eletrônica e por feixe de íons, técnicas estas que estão presentes na infraestrutura dos nossos laboratórios associados ao Centro de Pesquisa em Óptica e Fotônica. Plasmons de superfície gerados em estruturas de geometria específicas resultam em campo com polarizações específicas que podem ser detectadas em campo longínquo e que fornecem informações sobre a geometria e proximidades da nanoestrutura. Estas estruturas podem ser utilizadas como sensores para detecção de moléculas com atividade óptica.

**Palavras-chave:** Litografia por feixe de elétrons. Nanoplasmonica. Nanofabricação.

#### Referências:

- 1 ALVES, M. V. **Estudo de técnicas de nanofabricação aplicadas a filmes semicondutores**. 1999. 101 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1999.
- 2 RAY-CHOUDHURY, P. **Handbook of microlithography, micromachining and microfabrication**. New York: Cornell University, 1996. v. 1, 768 p.
- 3 YOO, C. S. **Semiconductor manufacturing technology**. Singapore: World Scientific, 2008. v. 13, 484 p.

## PG29

# Desenvolvimento de um sistema unilateral de RMN para aplicação em meios porosos

BRAZ, D. C.<sup>1</sup>; VIDOTO, E. L. G.<sup>1</sup>; AMORIM, A. D. F.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

dcbraz@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a sua proposição em 1945, a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) vem se desenvolvendo como um campo de pesquisa inesgotável, fornecendo informações ao nível molecular em diversas áreas como a física, química, biologia e medicina, tendo sua aplicação cada vez mais ampliada pelo avanço das técnicas e dos equipamentos de RMN. Uma nova evidência desse fato é a possibilidade de realização de experimentos de RMN in situ (e.g. em formações rochosas, poços de petróleo, lençóis freáticos, ossos, etc.), em função do desenvolvimento de sistemas unilaterais de RMN. (1) Em geral, isso se deve ao pequeno porte desses sistemas, que se traduz em portabilidade, e aos campos magnéticos estáticos ( $B_0 \sim 5$  kG) e de radiofrequência (rf) gerados externamente. Esses sistemas unilaterais de RMN são compostos basicamente por um magneto permanente unilateral (fonte de  $B_0$ ) e uma bobina de rf superficial (utilizada para excitação e detecção), ambos acoplados a um console de RMN. Um atributo importante desses magnetos unilaterais é, além da geração do campo  $B_0$ , a presença natural de intensos gradientes de campo magnético ( $\sim 1,5$  kG/cm), que, em conjunto com bobinas de rf, permitem: (i) a excitação seletiva de diferentes profundidades da amostra e (ii) o controle da espessura da fatia a ser excitada. Pelo forte interesse do Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução (LEAR) em pesquisa e desenvolvimento de sistemas de RMN, e pela grande aplicabilidade em Ciência do Petróleo – Meios Porosos, o sistema unilateral de RMN foi escolhido como tema do doutorado deste autor. O trabalho de doutorado em questão envolve o desenvolvimento em duas frentes. Em uma delas, está sendo utilizado um magneto unilateral comercial (BRUKER), equipado com uma bobina de rf superficial, em conjunto com o console portátil modelo LapNMR (Tecmag). O conjunto magneto-bobina de rf desse sistema unilateral já foi plenamente caracterizado e o equipamento como um todo está sendo empregado para o estudo de compostos padrão e meios porosos artificiais e reais. Na segunda frente do trabalho, está sendo desenvolvido um magneto unilateral para a mesma finalidade. Como esses magnetos não são mais comercializados individualmente, essa etapa do projeto tomou proporções estratégicas para o LEAR. Para o desenvolvimento do magneto unilateral, estão sendo utilizadas ferramentas computacionais baseadas no método dos elementos finitos. (2) Em termos da perspectivas de utilização do sistema unilateral de RMN em desenvolvimento, destacamos a montagem de uma ferramenta de perfilagem de poço de petróleo (Well Logging) (3) em escala de laboratório, que contém um sistema de RMN similar.

**Palavras-chave:** RMN unilateral. Meios porosos. Ciência do petróleo.

### Referências:

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

2 JIN, J. M. **The finite element method in electromagnetics**. New York: Wiley, 1993.

3 COATES, G. R. et al. **NMR logging: principles and applications**. Houston: Halliburton Energy Services, 1999.

## PG30

### **Nanostructured biosensors for the detection of Adiponectin hormone and studies of its correlation with Diabetes Mellitus type 2**

BRAZACA, L. C.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

laiscbrazaca@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Obesity and its consequences have become a worldwide health issue. One of the diseases related to obesity is diabetes mellitus type 2, a metabolic disorder linked to insulin resistance. Obesity and insulin resistance may be connected by the decreased adiponectin hormone secretion under these conditions, which occurs 10 to 20 years before chronic hyperglycemia, and is a great indicator of diabetes type 2 further development. However, adiponectin plasma concentration tests are currently made by ELISA and are not widely used due to its high price, personal and material demand, restricting pre-diabetics diagnoses for few patients.(1) We propose an impedance biosensor for adiponectin detection based on nanostructured platforms containing immobilized adiponectin transmembrane receptors (AdipoR1 and AdipoR2) or anti-adiponectin antibodies, both being immobilized by SAM. These devices will be used on plasma samples of several subjects, and the relation between the hormone concentration and the patient's health condition will also be investigated. Preliminary results show that Cysteamine/Receptors and 3-mercaptopropionic/EDC/NHS/Receptors electrode coatings were able to detect adiponectin, with the best results being achieved by the last.(2) It is expected that such devices increase the number of pre-diabetics diagnostics, promoting early treatment and patients awareness about the precautions to be taken.

**Palavras-chave:** Diabetes. Biosensor. Adiponectin.

#### **Referências:**

1 BRAZACA, L.C. **Biossensores nanoestruturados para a detecção do hormônio Adiponectina e estudos de sua correlação com diabetes mellitus tipo 2**. São Paulo: FAPESP, 2013. 25p. Projeto de Pesquisa.

2 TAVAREZ, L.C. **Desenvolvimento de biossensor para diagnóstico de Diabetes mellitus tipo 2 baseados em dosagens dos níveis de adiponectina**. São Paulo: CNPq, 2012. 12p. Relatório final de bolsa de iniciação científica do CNPq.



## PG31

### **Novos candidatos a agroquímicos para a cultura da cana-de-açúcar: descoberta e planejamento de inibidores da biossíntese de folatos**

BUENO, R. V.<sup>1</sup>; MALUF, F. V.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

renata.bueno@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos – USP

O cenário ambiental, marcado pela relação direta entre a utilização intensiva de combustíveis fósseis, a liberação de gases de efeito estufa e alterações climáticas, aponta a necessidade de fontes de energia renováveis e tecnologias de baixa emissão de carbono. Nesse contexto, a agroenergia constitui uma alternativa promissora para a produção de energia limpa a partir de derivados da biomassa. O Brasil, consolidado como um dos maiores produtores e exportadores mundiais de produtos agrícolas e biocombustíveis líquidos, é referência mundial em agroenergia e possui características territoriais e climáticas favoráveis para destacar-se nesse segmento. A crescente participação de derivados da cana-de-açúcar na matriz energética brasileira indica o desenvolvimento do setor sucroalcooleiro como estratégico para a economia nacional. Atualmente, o Brasil produz 23 bilhões de litros de etanol por ano e estima-se, para os próximos 10 anos, um aumento de, aproximadamente, 60% na demanda por combustíveis veiculares.(1) Para tal, fatores capazes de comprometer o rendimento produtivo da cana-de-açúcar devem ser rigorosamente controlados, com o objetivo de garantir o crescimento da produção e atender o cenário de expansão projetado para as próximas décadas. Dentre esses fatores, estão fitopatologias causadas por bactérias, fungos e vírus. A escaldadura das folhas, causada pela bactéria *Xanthomonas albilineans* (Ashby) Dowson, é uma das cinco fitopatologias mais importantes que atingem a cana-de-açúcar, resultando em significativa diminuição da produtividade, necessidade de reforma precoce dos canaviais e queda da qualidade do caldo extraído.(2) A ausência de agentes químicos ou biológicos para o controle somado ao impacto dessa fitopatia estimula a pesquisa de moléculas bioativas candidatas a novos defensivos agrícolas. A enzima *N5,N10*-metilenotetrahidrofolato desidrogenase-ciclodrolase de *X. albilineans* (XaFolD) foi selecionada como alvo molecular para o desenvolvimento de novos candidatos a agroquímicos. A XaFolD desempenha função essencial na via de biossíntese de folatos que são fundamentais para a replicação bacteriana. A abordagem proposta nesse projeto visa a elucidação da estrutura tridimensional da XaFolD e a descoberta de inibidores potentes e seletivos como candidatos a novos agroquímicos. Para tanto, métodos de clonagem, expressão, purificação, cristalização e determinação estrutural da XaFolD, bem como ensaios enzimáticos, triagem biológica e determinação da atividade dos inibidores identificados serão desenvolvidos através da integração de estudos em Biologia Molecular Estrutural e Química Medicinal. Durante o desenvolvimento deste projeto já foi realizada a clonagem do segmento codificante da XaFolD (891pb), empregando-se três diferentes vetores (pETM-11, pETTrx-1a e pETNus-1a) no sistema de Ligação Independente de Clonagem (LIC).(3) As construções resultantes foram utilizadas para a transformação de células de expressão *Escherichia coli* Rosetta (DE3) e a avaliação da expressão proteica dessas construções demonstrou a expressão solúvel de XaFolD. Atualmente, encontra-se em desenvolvimento protocolos para expressão em larga escala e purificação da enzima. Após a obtenção

da enzima com adequado rendimento e elevado teor de pureza, serão realizados ensaios de cristalização e difração de raios-X para elucidação da estrutura 3D, assim como ensaios cinéticos para a identificação de moléculas bioativas potencialmente inibidoras da XaFold.

**Palavras-chave:** Cana-de-açúcar. Agroquímicos. Escaldadura das folhas.

#### **Referências:**

- 1 BRASIL. Ministério de Minas e Energia. Empresa de Pesquisa Energética. **Plano decenal de expansão de energia 2020**. Brasília, 2011. 319 p.
- 2 BIRCH, R. G. *Xanthomonas albilineans* and the antipathogenesis approach to disease control. **Molecular Plant Pathology**, v. 2, n. 1, p. 1-11, 2001.
- 3 ASLANIDIS, C.; DE JONG, P. J. Ligation-independent cloning of PCR products - LIC-PCR. **Nucleic Acids Research**, v. 18, n. 20, p. 6069-6074, 1990.

## PG32

### **Avaliação dos efeitos da terapia fotodinâmica usando o modelo tumoral em membrana corioalantóica com células de melanoma e Ehrlich**

BUZZA, H. H.<sup>1</sup>; SILVA, L. V.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

hilde.buzza@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica (TFD) é um tratamento para diversas doenças, entre elas o câncer, que vem tendo grandes avanços ao longo dos anos. Essa modalidade terapêutica consiste na interação entre luz e uma substância fotossensibilizadora, levando à transformação do oxigênio molecular existente na célula em oxigênio singleto, que é altamente reativo e citotóxico. (1) O modelo de Membrana Corioalantóica (do inglês, CAM) em ovos de galinha é formado por uma membrana transparente com acesso direto aos vasos sanguíneos, que permite a avaliação do efeito vascular dessa terapia. (2) O uso desse ambiente previamente vascularizado, para o desenvolvimento de um tumor, possibilita o estudo de novas modalidades terapêuticas com o entendimento de todo o processo de angiogênese envolvido no câncer e dos mecanismos que envolvem o crescimento e destruição do tumor, uma vez que são os vasos sanguíneos os responsáveis por sua nutrição e crescimento. As células tumorais empregadas para o desenvolvimento do tumor podem ser de diversas linhagens e podem-se variar as formas de aplicação, com a introdução de culturas celulares ou pedaços de biópsias tumorais. (3) Foram aplicados 100  $\mu$ L de meio de cultura de célula de melanoma murino B16F10 sobre o modelo CAM e também 100  $\mu$ L da forma fluida do tumor de Ehrlich para o desenvolvimento de dois tipos de células tumorais para a comparação dos resultados. Além disso, foram colocados sobre a membrana pedaços de biópsias de melanoma desenvolvido em camundongo hairless e tumor de Ehrlich em sua forma sólida subcutânea. Histologia e imagens por microscopia confocal foram usadas para avaliar a viabilidade das células e a sua interação com os vasos. A partir do modelo estabelecido, foram testados dois tipos de fotossensibilizadores: Photogem® e Photoditazine®, derivados de hemato-porfirina e clorina, respectivamente. Variações dos parâmetros de dose de luz e fluência serão testadas no modelo para a escolha do melhor protocolo da Terapia Fotodinâmica e as respostas vascular e tumoral serão acompanhadas ao longo do tempo com aquisição de imagens por uma câmera USB para e análise e quantificação do efeito pós terapia. O desenvolvimento de um tumor num modelo alternativo ao uso de animais, como é o caso da CAM, e que permite a visualização direta das respostas é uma opção promissora para o entendimento de como entender e aperfeiçoar as terapias já existentes.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Membrana corioalantóica. Modelo tumoral.

#### **Referências:**

1 WILSON, B. C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. 61-109, 2008.

2 FINGAR, V. H. Vascular effects of photodynamic therapy. **Journal of Clinical Laser Medicine and Surgery**, v. 14, n. 5, p. 323-328, 1996.

3 BALKE, M.; NEUMANN, A.; KERSTING, C.; AGELOPOULOS, K.; GEBERT, C.; GOSHEGER, G.; BUERGER, H.; HAGEDORN, M. Morphologic characterization of osteosarcoma growth on the chick chorioallantoic membrane. **BMC Research Notes**, v. 58, n. 3, p. 1-8, 2010.

## PG33

### An asymmetric transition between symmetric states: the glucosamine 6-phosphate deaminase allostery

CAMARA, A. S.<sup>1</sup>; REBOREDO, E. H.<sup>1</sup>

amanda.camara@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Allosteric systems are characteristic of proteins with more than one equilibrium state. An enzyme experiences a modification of its activity when a cooperative substrate binds to one state or another, thus, establishing a change in population equilibrium. X-ray diffraction and NMR experiments already demonstrated this dynamic equilibrium, and simulation methods, as molecular dynamics and normal mode analysis, generally provide a more complete description. The allosteric enzyme Glucosamine-6-Phosphate Deaminase (GlcN6PD) is a good model to better understand the equilibrium dynamics as essential to the protein function, given the reversibility of its catalysis, its relative small size and rapid-equilibrium kinetic mechanism. It also has the structure elucidated for both its conformers. A computational approach would now give better perspective on how the conformational changes occur. A set of results were obtained using these methods: (a) a 100ns dynamic starting at the hexameric T conformer, explicitly solvated, building a NVT ensemble using NAMD program and CHARMM force field; (b) a principal components analysis making use of the calculated dynamics; (c) and normal mode analysis of the T conformer structure. As the allosteric transition is described, in theory, as only tertiary and quaternary structural changes, analysis taken here aimed for global movements, or the displacements of some characteristic regions that act like rigid body subunits. Hence, inertia tensor analysis was developed, since it should act as a filter for the high frequency and functionally uninteresting motions. These analysis indeed showed the GlcN6PD passing through conformational changes that correspond to the allosteric transition. Within 100ns of a molecular dynamics and in the normal mode analysis, structural analysis showed that all its 6 protomers reached the R state, being capable, at this point, of holding a ligand in the allosteric site (as simulated in a 20ns dynamics). Although, different from the expected by Monod's theory, the 6 protomers did not make the transition all together in a symmetrical way. Nevertheless, energy analysis revealed that the energy required to these structural changes to occur is well provided by the thermal bath, being less than  $kT$ .

**Keywords:** Allostery. Molecular dynamics. Inertia tensor.

#### Referências:

1 MONOD, J.; WYMAN, J.; CHANGEUX, J. P. On the nature of allosteric transitions: a plausible model. **Journal of Molecular Biology**, v.12, p. 88-118, 1965. Disponível em: <<http://www.pasteur.fr/ip/resource/filecenter/document/01s-00004j-0er/monod-wyman-changeux-1965.pdf>>. Acesso em: 19 ago. 2013.

2 VILALI, J; KERN, D. Choreographing an enzyme's dance. **Current Opinion on Chemical Biology**,

v. 14, n. 5, p. 636-643, 2010.

3 HORJALES, E.; ALTAMIRANO, M. M.; CALCAGNO, M. L.; GARRATT, R. C.; OLIVA, G. The allosteric transition of glucosamine-6-phosphate deaminase: the structure of the T state at 2.3 Å resolution. **Structure**, v. 7, n. 5, p. 527-537, 1999.

## PG34

### Numerical simulations of nanowires under magnetic fields

CAMPO, T.<sup>1</sup>; FARIA JUNIOR, P. E.<sup>1</sup>; SIPAHI, G. M.<sup>2</sup>

tiagocampo@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP / University at Buffalo - SUNY, USA

Recent advances of growth techniques allowed the fabrication of high quality semiconductor nanostructures called nanowires. (1) These structures lead to development of novel devices based on the control of their states, which can be done using light, electric and magnetic fields (2). In order to investigate the optical and electronic properties of such structures, the **k.p** method is often used. Although this theoretical approach is one of the most efficient to treat confined systems, the size of modeled matrices can easily reach giga elements. Therefore, alternative approaches to the direct diagonalization of the eigen-pairs must be pursued. One alternative is the use of interactive diagonalization methods such as the one based on the LOBPCG minimization method. (3) In this study, we derive an approach based on the **k.p** method with an external magnetic field to analyze the band structure of nanowires. Since we want to deal with large systems and/or well described potentials, we also investigate the eigen-pair convergence rates using LOBPCG diagonalization.

**Keywords:** Nanofios. Campo magnético. LOBPCG.

#### Referências:

1 VU, T. T. T.; ZEHENDER, T.; VERHEIJEN, M. A.; PLISSARD, S. R.; IMMINK, G. W. G.; HAVERKORT, J. E. M.; BAKKERS, E. P. A. M. High optical quality single crystal phase wurtzite and zincblende InP nanowires. **Nanotechnology**, v. 24, n. 11, p. 115705, 2013.

2 DURNEV, M. V.; GLAZOV, M. M.; IVCHENKO, E. L.; JO, M.; MANO, T.; KURODA, T.; SAKODA, K.; KUNZ, S.; SALLEN, G.; BOUET, L.; MARIE, X.; LAGARDE, D.; AMAND, T.; URBASZEK, B. Magnetic field induced valence band mixing in [111] grown semiconductor quantum dots. **Physical Review B**, v. 87, n. 8, p. 085315, 2013.

3 KNYAZEV, A. V. Toward the optimal preconditioned eigensolver: locally optimal block preconditioned conjugate gradient method. **SIAM Journal on Scientific Computing**, v. 23, n. 2, p. 517, 2001.

## PG35

### Combinação de duas modalidades terapêuticas na pele fotoenvelhecida: terapia fotodinâmica e LEDterapia

CAMPOS, C. P.<sup>1</sup>; JORGE, A. E.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

carolinapancampos@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Ao envelhecer sem a interferência da luz solar, a pele humana sofre modificações em sua aparência e em sua função mecânica. Essas mudanças podem ser agravadas e antecipadas por agentes ambientais como, por exemplo, a radiação ultravioleta (UV) que, em excesso, tem como efeito biológico o fotoenvelhecimento cutâneo e, em última instância, a fotocarcinogênese.(1) Os altos níveis de radiação UV que atingem a superfície terrestre e a falta de conscientização favorecem a alta incidência do envelhecimento precoce e consequentemente a busca por tratamentos rejuvenescedores. Os mais populares dentre esses tratamentos são os sistemas a laser e o *peeling* químico, que apresentam efeitos colaterais como redução da epiderme e formação de cicatrizes. A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma técnica não invasiva que tem sido utilizada nas últimas duas décadas para o tratamento de várias disfunções da pele. Recentemente, vem sendo estudada como alternativa para o tratamento da pele fotoenvelhecida, com o propósito de reverter essa condição com nenhum ou mínimo efeito colateral. Dentre os estudos publicados que abordam este tema, a maioria realiza a pesquisa em humanos e poucos apresentam resultados histopatológicos devido à inviabilidade de realizar biópsia nas regiões tratadas - principalmente no rosto. Este trabalho propõe a combinação de duas técnicas no tratamento da pele fotoenvelhecida de camundongos sem pelo (*hairless*) - a TFD utilizando iluminação fracionada seguida pela fototerapia com LED amarelo. Serão utilizados camundongos *hairless* da linhagem SKH1, animais albinos e imunocompetentes bem estabelecidos como modelos para fotoenvelhecimento e carcinogênese. Esses animais em idade adulta (6 a 8 semanas) serão fotoenvelhecidos através da exposição a uma lâmpada fluorescente com banda no UVB (290-315nm, Philips TL 40W/12 RS). A TFD será realizada com o agente precursor ácido 5-aminolevulínico tópico a 20% e iluminação fracionada com LED azul (400-420nm). A região tratada pela TFD será exposta a um LED amarelo (590nm), modulado para permanecer 250ms ligado e 100ms desligado, na tentativa de fotomodular a síntese de colágeno. Em estudos publicados pode-se encontrar que a iluminação fracionada supera a iluminação em dose única em termos de eficiência da TFD.(2) Também é encontrado que a iluminação com luz amarela contribui para a reconstrução do colágeno na derme.(3) Logo, é esperado que a combinação da TFD utilizando iluminação fracionada com iluminação amarela pós TFD se mostre mais efetiva no processo de recuperação da pele. Finalmente, será realizada uma avaliação macroscópica da pele envolvendo uma análise clínica e por fluorescência. Também serão realizadas análises histopatológicas com os corantes hematoxilina-eosina, tricômio de Masson e Verhoeff's van Gieson para avaliar componentes como fibroblastos, fibras colágenas e elastina. Dessa forma, será possível a obtenção de resultados quantitativos, o que favorecerá ao entendimento da combinação das técnicas e otimização de seus efeitos na pele fotodanificada (ou fotoenvelhecida).

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Fotoenvelhecimento. Fotomodulação.



## Referências:

- 1 GOLDBERG, D. J. . Photodynamic therapy in skin rejuvenation. **Clinics in Dermatology**, v. 26, n. 6, p. 608-613, 2008.
- 2 ROBINSON, D. J.; BRUIJN, H. S.; STAR, W. M.; STERENBORG, H. J. C. M. Dose and timing of the first light fraction in two-fold illumination schemes for topical ALA-mediated photodynamic therapy of hairless mouse skin. **Photochemistry and Photobiology**, v. 77, n. 3, p. 319-323, 2003.
- 3 WEISS, R. A.; McDANIEL, D. H.; GERONEMUS, R. G.; WEISS, M. A. . Clinical trial of a novel non-thermal LED array for reversal of photoaging: clinical, histologic, and surface profilometric results. **Lasers in Surgery and Medicine**, v. 36, n. 2, p. 85-91, 2005.

## PG36

# D'yakonov-Perel' spin relaxation in quantum wells with intersubband spin-orbit interaction

CANDIDO, D. R.<sup>1</sup>; PENTEADO, P. H.<sup>1</sup>; EGUES, J. C.<sup>1</sup>

denisricardocandido@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

In systems with spin-orbit (SO) coupling, it is possible to electrically manipulate the electron spin via applied gate voltages. This allows for the potential use of the spin degree of freedom (Spintronics) in the development of new devices and technologies, for instance information technology (quantum computing). (1) It is known however, that SO interaction leads to the undesired effect of causing spin relaxation and spin dephasing. Thus from the point of view of applications, it is desirable to maximize the spin lifetimes. Here, we investigate the spin relaxation of the conduction electrons in quantum wells with two sub-bands grown along the [001] and [110] directions via the D'yakonov-Perel' mechanism. By combining group theory, the k.p method, the envelope function approach and the Löwdin perturbation theory, we obtain an effective Hamiltonian for the conduction electrons in the presence of the Rashba and Dresselhaus SO interactions. Differently from some early works, in addition to the cubic Dresselhaus term, we also account for the contributions arising from the second lowest sub-band of the well. We derive expressions for the spin relaxation times and analyze how the new contributions (second sub-band terms) affect the spin lifetimes. We compare the relaxation times obtained in the [001] direction with those calculated for the [110] direction. Our results show that the contributions from the second sub-band are negligible for both directions. We also find that the relaxation time in the [110] direction is longer than the one in the [001], a result consistent with experiments (2) and earlier theoretical works. (3)

**Keywords:** Spin-orbit interaction. Effective hamiltonians for quantum wells. D'yakonov-Perel' spin-relaxation mechanism.

### Referências:

- 1 LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. . Quantum computation with quantum dots. **Physical Review A**, v. 57, n. 1, p. 120-126, 1998.
- 2 OHNO, Y. et al. Spin relaxation in GaAs (110) quantum wells. **Physical Review Letters**, v. 83, n.20, p. 4196-4199, 1999.
- 3 KARIMOV, O. Z. et al. . High temperature gate control of quantum well spin memory. **Physical Review Letters**, v. 91, p. 246601, 2003. doi:10.1103/PhysRevLett.91.246601.

## PG37

### Polaron in ultra-cold atoms

CARACANHAS, M.A.<sup>1</sup>; BAGNATO, V.S.<sup>1</sup>; PEREIRA, R.G.<sup>1</sup>

caracanhas@ursa.usp.ifsc.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

We considered a vortex array Bose-Einstein condensate and analyze the properties of an bosonic impurity trapped in this vortex lattice system. The presence of the Tkachenko modes of the lattice allow us to characterize the dressed impurity state and the resulting polaronic system shows an interesting parabolic dispersion (marginal interaction). Comparison with the Holstein polaron results and further applications for our system that goes beyond the usual acoustic phonons reservoir will be described. Our next step will be study a mixture of two superfluid components (using different atomic species), one immersed in a second containing an array of vortices. Making close analogy with the superfluid in an optical lattice, we map our system Hamiltonian onto a Bose-Hubbard type model and tune the atomic scattering length to induce a quantum phase transition in the condensed species. This is a new quantum system which allows investigation beyond the present studies with static optical lattices.

**Keywords:** Polaron. Vortices lattice. Tkachenko mode.

#### Referências:

1 CARACANHAS, M.A; BAGNATO, V.S; PEREIRA, R.G. **Tkachenko polarons in vortex lattices**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1307.0144>>. Acesso em: 23 ago. 2013.

## PG38

### Construction of a global map of protein-protein interactions in c-di-GMP signalling pathways of *Pseudomonas aeruginosa*

CARDOSO, A. R.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

andrea.cardoso@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The ability of bacteria to switch from a planktonic to a sessile lifestyle — the former being the state in which bacteria are free-swimming cells and the latter, the state in which biofilms are formed — is closely related to intracellular levels of a small signaling molecule. C-di-GMP, as it is known, is a key element in the intricate and still mostly unclear system that mediates this transition. (1) Diguanylate cyclase enzymes from the GGDEF family (synthesis) and phosphodiesterase enzymes from the EAL and the HD-GYP families (degradation) regulate c-di-GMP levels, while effector molecules, such as PilZ and degenerate EAL or GGDEF domain-containing proteins, interact with it, causing changes to the phenotypes expressed by the bacterial cells. For instance, high levels of c-di-GMP usually result in biofilm formation, a condition that is predominant in chronic infections due to the increased bacterial resistance to antibiotics associated with this structure. (1) Studies published over the last few years have demonstrated that direct protein-protein interactions between members of the c-di-GMP signaling pathways play an important role in its regulation and signal specificity. (2) Therefore, the present study proposes a global investigation of the probable network of interactions between all proteins containing GGDEF, EAL, HD-GYP and PilZ domains in *P. aeruginosa*. The bacterial two-hybrid system allows the revealing of these kind of interactions by the activation of reporter genes by recombinant "bait" and "target" plasmids of the possible interacting pairs of proteins. This is achieved by cotransformation of a reporter strain with these plasmids, followed by coexpression of the recombinant proteins in the cell, which, in its turn, only leads to activation of the reporter genes if the expressed proteins are interaction partners. (3) For this purpose, two libraries of recombinant DNA for both "bait" and "target" vectors (each containing 130 sequences) are currently being constructed. This process includes, for each DNA sequence, the steps of primer design, sequence amplification, restriction of sequence and vector with the appropriate enzymes, ligation of the insert into the vectors, transformation of the propagation strain with the ligation reaction, and recombinant DNA extraction. To verify and validate the sequences of the recombinant DNA obtained, extra steps of restriction analysis and sequencing are performed. Also, to this point, standardization tests have been performed so that the two-hybrid interaction tests can be carried out. It is expected that this analysis provides more information about the molecular mechanisms involved in c-di-GMP signaling. In addition, these results can lead to further investigation of the interactions discovered and help even more with the unraveling of this complex system.

**Keywords:** c-di-GMP. Protein-protein interaction. Bacterial biofilms.

#### Referências:

1 RÖMLING, U.; GALPERIN, M.Y.; GOMELSKY, M. Cyclic di-GMP: the first 25 years of a universal

bacterial second messenger. **Microbiology and Molecular Biology Review**, v. 77, n. 1, p. 1-52, 2013.

2 LINDENBERG, S. et al. The EAL domain protein YciR acts as a trigger enzyme in a c-di-GMP signalling cascade in *E. coli* biofilm control. **The EMBO Journal**, v. 32, n. 14, p. 1-14, 2013.

3 JOUNG, J. K.; RAMM, E. I.; PABO, C.O. A bacterial two-hybrid selection system for studying protein-DNA and protein-protein interactions. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 97, n. 13, p. 7382-7387, 2000.

## PG39

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

CARUSO, J. S.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>

jeremihas.caruso@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Muitos fenômenos que envolvem a interação entre agentes distintos e que não têm seu desenvolvimento centralmente controlado resultam numa organização topológica entre os diversos agentes formando uma rede complexa(1). Um caso importante de rede complexa é a rede de roteadores que forma a Internet. A principal dinâmica nessa rede é o tráfego de pacotes que vão de um roteador a outro passando por alguns roteadores intermediários, determinados por um algoritmo de roteamento(2). No trabalho aqui proposto pretendemos analisar não as características globais do tráfego, como a presença ou não de congestionamento na rede como um todo, mas fazer uma análise sistemática das características locais (isto é, de roteadores específicos) do tráfego no ponto de transição entre a fase livre e a fase de congestionamento. Espera-se que nesse ponto haja grande flutuação das características de tráfego(3) entre roteadores distintos, possivelmente com congestionamentos locais transientes, que desejamos estudar e correlacionar com características topológicas da rede e do roteador. Os estudos serão realizados com o uso de um simulador de rede, para possibilitar um controle adequado dos parâmetros e uma avaliação de todas as características desejadas.

**Palavras-chave:** Redes complexas. Roteamento. Transiente.

#### Referências:

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

## PG40

### Estudo do modelo estocástico PARPM

CARVAJAL JARA, D. A.<sup>1</sup>; ALCARAZ, F. C.<sup>1</sup>

dacj1984@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos – USP

Em fenômenos críticos gerais, certos tipos de quantidades são independentes dos detalhes dos sistema como poderia ser o espaçamento da rede e são classificados em distintas classes de universalidade de comportamento crítico. Estas classes de universalidade são descritas por quantidades universais que dependem de quantidades como as simetrias, a dimensão do parâmetro de ordem e a dimensão do sistema. Com o desenvolvimento da Teoria de Invariância conforme (CFT), mostrou-se que modelos críticos que apresentam invariância de dilatação, rotação e translação são também invariantes conformes e os mesmos são classificados em classes específicas de universalidade. Desta forma dois modelos com a mesma classe de universalidade por muito diferentes que sejam suas dinâmicas ou suas redes a curtas distâncias e tempos, elas terminam apresentando comportamento termodinâmicos a longa distância (ou tempo) semelhantes. O Escopo dos sistemas críticos e da universalidade compreende também modelos estocásticos em não equilíbrio e sistemas dinâmicos complexos. Recentemente a teoria de criticalidade auto-organizada (SOC) tem sido aplicada para estudar diversos sistemas como terremotos, a dinâmica neural, redes elétricas, reservatórios de água, e avalanches de neve (Ver referencias em (1)). Contudo, diferentemente dos casos críticos de equilíbrio não se sabe ainda quais seriam os ingredientes fundamentais que garantiriam em fenômenos críticos de não equilíbrio a invariância conforme. Procurando encontrar tais ingredientes fundamentais em modelos estocásticos de não equilíbrio, estudaremos o modelo estocástico PARPM recentemente desenvolvido (2) que apresenta fases massivas, criticalidade, invariância conforme e estados auto-organizados. Este modelo estocástico foi o primeiro modelo a apresentar invariância conforme, isto é, as funções de correlação espaciais e temporais são relacionadas. Este modelo possui alguns ingredientes considerados importantes na dinâmica dos modelos SOC, tais como avalanches e estados absorventes (3), além disso tem sido mostrado que com a mudança de um dos parâmetros dos modelo podemos ter quebra da invariância conforme. O estudo apresentado até o momento (2) para o modelo PARPM foi feito para a situação em que as taxas de absorção  $U_a$  e de desorção  $U_b$  nos processos do modelo são iguais, isto, é,  $U = U_a/U_b = 1$ . Inicialmente estudaremos o modelo no caso geral em que  $U \neq 1$ . A ideia é determinar o diagrama de fases do modelo no espaço de parâmetros  $(p, U)$ . Questões sobre a extensão da fase com invariância conforme são relevantes e atuais. Atualmente tem sido desenvolvidos alguns programas em Fortran necessários para o desenvolvimento do projeto. Atualmente estamos verificando se nossos resultados coincidem com os conhecidos (já publicados) bem como fazendo uma revisão da literatura pertinente.

**Palavras-chave:** Teoria de campos conforme. Transições de fase em estados absorventes. Criticalidade auto-organizada SOC.

**Referências:**

- 1 ARAUJO, N. A. M. Viewpoint: getting out of control. **Physics**, v. 6, n. 90, 2013. Disponível em: <<http://physics.aps.org/articles/v6/90>>. Acesso em: 19 ago. 2013.
- 2 ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. A conformal invariant growth model. **Journal of Statistical Mechanics**, n. 12, p.12032, 2010. doi: 10.1088/1742-5468/2010/12/P12032 .
- 3 ALCARAZ, F.C.; RITTENBERG, V. From conformal invariance to quasistationary states. **Journal of Statistical Mechanics**, p. 09030, 2011. doi :10.1088/1742-5468/2011/09/P09030 .



## PG41

### Development and solid state characterization of a new paroxetine modification

CARVALHO JR, P. S.<sup>1</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>

paulo.sousa@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Paroxetine is a selective Serotonin Reuptake Inhibitors, is widely used in the treatment of the depression.(1) Since 80, only the hydrochloride form,  $(PRX^+ \times Cl^-) \times H_2O$ , has been used in the pharmaceutical formulations.(1-3) Here we report two new solid forms, the nitrate and bromide salts of paroxetine. The paroxetine hydronitrate, crystallizes in the space group C2 with one paroxetine protonated molecule, one nitrate ion and one water molecule per asymmetric unit. The PRX molecule is composed by one piperidine ring and two aromatic groups. The least square planes through these last two groups form an angle of 69.78°. The piperidine ring is protonated, characterizing the salt formation. This ring interacts with the nitrate ion forming a 1D infinite chain through  $NH_2^+ \dots O$  hydrogen bonds along the b axis. Adjacent chains are arranged in an antiparallel way and linked on to another through  $C - H \dots O$  non classical hydrogen bonds as well as  $C-H \dots \pi$  intermolecular contacts along the a axis. Water channels are present in the crystalline packing and link two  $PRX^+NO_3^-$  molecular complex along the [001] direction. The paroxetine hydrobromide,  $(PRX^+ \times Br^-) \times H_2O$ , crystallizes in the space group  $P2_1$  with two independent conformers as well as one water molecule per asymmetric unit. The conformers differ by the C6-O4-C7-C12 torsion angle and the angle between least-square planes passing through the aromatic rings. The crystal structure shows the presence of  $NH_2^+ \dots Br$ ,  $OH \dots Br$  and  $NH_2^+ \dots O$  intermolecular hydrogen bonds. This crystal structure is isostructural to the reported for the hydrochloride form. In addition, thermal analysis of the paroxetine bromide shows a decrease of about 15 °C in the melting point when compared with  $(PRX^+ \times Cl^-) \times H_2O$  one. The spectroscopic  $NH_2^+$  stretching band, occurring between 3435-3350  $cm^{-1}$ , was essential for the ionic characterization of both salts depicted here.

**Keywords:** Antidepressant. New solid forms. Crystal structure.

#### Referências:

- 1 BOURIN, M.; CHUE, P.; GUILLON, Y. . Paroxetine: a review. **CNS Drug Reviews** , v.7, n.1, p. 25-47, 2001.
- 2 IBERS, J. A. Paroxetine hydrochloride hemihydrate. **Acta Crystallographica C** , v.55, pt.3, p. 432-434, 1999.doi:10.1107/S0108270198013444 .
- 3 YOKOTA, M.; UEKUSA, H.; OHASHI, Y. Structure analyses of two crystal forms of paroxetine hydrochloride. **Bulletin of the Chemical Society of Japan** , v.72, n.8, p.1731-1736, 1999. doi:10.1246/bcsj.72.1731 .

## PG42

# Desenvolvimento de nanopartículas superparamagnéticas e Core-Shell para aplicações em nanomedicina

CARVALHO, C. M.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

carinamc@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Inúmeras técnicas avançadas envolvendo novos materiais são utilizadas hoje no tratamento e diagnóstico de várias doenças genéticas, degenerativas ou infecciosas, incluindo o câncer. Algumas dessas técnicas são demasiadamente invasivas causando danos não só as células e tecidos comprometidos pela doença, mas aos tecidos e órgãos saudáveis. A Nanotecnologia tem-se mostrado um importante instrumento a medicina, já que busca principalmente minimizar o prejuízo ao organismo agindo de modo específico a doença. A convergência entre as áreas da Biotecnologia e a Nanotecnologia tem conduzido o desenvolvimento de novos nanobiocompósitos híbridos com funções sinérgicas que incorporam as propriedades de reconhecimento dos biomateriais com propriedades eletrônicas, óticas e catalíticas únicas das nanopartículas, por exemplo, numa área conhecida como Nanomedicina. Um dos principais desafios na área de Nanomedicina está na localização seletiva dentro das células cancerígenas para diagnóstico ou tratamento. Os complexos formados por nanopartículas funcionalizadas com moléculas de reconhecimento melhoram a biodistribuição e o direcionamento das nanopartículas até o tumor. (1) As nanopartículas, alojadas na região de interesse, podem, então, ser utilizadas para detecção precoce do câncer por meio de técnicas de imageamento, além de auxiliarem no tratamento, como por Hipertermia. Nanopartículas (NPs) de óxido de ferro, por exemplo, além de proporcionar melhor contraste em imagens de Ressonância Magnética, podem ser exploradas para guiar o agente teranóstico (terapia + diagnóstico) ao local de interesse, por meio de um campo magnético externo. O sucesso da aplicação desta técnica requer a síntese de suspensões coloidais estáveis de nanopartículas magnéticas em fluidos biocompatíveis que mantenham sua estabilidade em meio biológico. A localização das células tumorais é realizada através da funcionalização das nanopartículas superparamagnéticas como a magnetita (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) e as AuNPs com ligantes proteicos específicos para alvejar as células do tumor. As células podem captar nanopartículas coloidais por meio de um mecanismo específico, via receptor-ligante, ou não específico. A incorporação específica é mais eficiente, pois, neste caso, as nanopartículas modificadas com os receptores são predominantemente incorporadas pelas células de interesse. (2,3)

**Palavras-chave:** Nanotecnologia. Agente teranóstico. Câncer.

### Referências:

- 1 KUMAR, C. S. S. R. . **Biofunctionalization of nanomaterials**. Weinheim: WILEY-VCH, 2005. v.1.
- 2 SPERLING, R. A.; RIVERA GIL, P.; ZHANG, F.; ZANELLA, M.; PARAK, W. J. Biological applications of gold nanoparticles. **Chemical Society Review**, v. 37, n.9, p.1896-1908, 2008.



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

3 TUNCEL, D.; DEMIR, H.V. Conjugated polymer nanoparticles. **Nanoscale**, v. 2, n. 4, p.484-494, 2010.

## PG43

### **Utilização de técnicas fotônicas para avaliação da qualidade da matéria orgânica do solo sob plantação de cana-de-açúcar com diferentes manejos e tratos culturais**

CARVALHO, C. M.<sup>1</sup>; MILORI, D. M. B. P.<sup>2</sup>; SANTOS, C. H.<sup>3</sup>; LA SCALA JUNIOR, N.<sup>4</sup>; FIGUEIREDO, E. B.<sup>4</sup>; CORA, J. E.<sup>4</sup>; MARTIN NETO, L.<sup>2</sup>

camilamc.mila@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>EMBRAPA - CNPDIA

<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

<sup>4</sup>Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias - UNESP

Segundo (1) três das questões mais importantes para o século XXI serão o crescimento populacional; um decréscimo na disponibilidade per capita de solos cultiváveis e fontes de água renovável. A rápida degradação do solo sob exploração agrícola no mundo, especialmente nos países tropicais em desenvolvimento, despertou nas últimas décadas, a preocupação com a qualidade do solo e a sustentabilidade da produção agrícola. Em face ao bom desempenho da agricultura brasileira, cresce também a responsabilidade por uma produção sustentável. Particularmente, o sistema produtivo da cana-de-açúcar vem se adaptando a uma produção sem queima, e busca formas alternativas de manejo dos resíduos da produção que sejam sustentáveis tanto economicamente, quanto ambientalmente. Nesse contexto é necessário definir atributos do solo e ambiente sensíveis ao manejo e de fácil determinação. Em (2) é citada uma proposta de um conjunto mínimo de variáveis químicas, físicas e biológicas, que, acompanhadas ao longo do tempo, são capazes de detectar as alterações da qualidade do solo em função do manejo. O carbono orgânico total (CT) e a matéria orgânica do solo (MOS) encontram-se entre essas variáveis. O solo e sua vegetação são o terceiro maior reservatório de carbono da Terra, e o solo é considerado o melhor compartimento para realizar sequestro de carbono da atmosfera (3). Atualmente, para se avaliar condições de sequestro de carbono no solo é realizada a quantificação de carbono utilizando-se técnicas que verificam a composição elementar das amostras, como nos analisadores elementares. As informações sobre a estabilidade do carbono são obtidas por análise do ácido húmico extraído quimicamente da MOS, através da espectroscopia de ressonância magnética nuclear. Este método, entretanto, não pode ser aplicado em larga escala para a obtenção de mapas de inventários de carbono, o que justifica a busca pelos cientistas de solo por novos métodos que viabilizem este tipo de análises. Neste trabalho utilizamos técnicas fotônicas de espectroscopia de emissão ótica assistida por laser e fluorescência induzida por laser para quantificação de carbono e avaliação de sua estabilidade no solo. Nossa finalidade é comparar as técnicas tradicionais de medição de carbono e grupos funcionais da matéria orgânica do solo (MOS) com as técnicas fotônicas citadas, que operacionalmente tem demonstrado vantagens como alta sensibilidade, utilização de pequenas quantidades de amostras, fácil execução com economia de tempo, custo e possível portabilidade para

serem levadas a campo. Do ponto de vista agrônomo apresentamos resultados parciais do efeito de algumas formas de manejo e tratamentos culturais para a quantidade de carbono e a MOS. Avaliamos os manejos de cana crua e cana queimada, e num segundo experimento o aporte de cinzas e torta de filtro em diferentes doses na cana crua. Na agroindústria da cana é comum a incorporação desses subprodutos no solo como via de descarte, e tem sido uma saída relativamente simples e econômica para o setor. Entretanto, não há muitos estudos a respeito dos efeitos desse tipo de prática para a MO, emissão de CO<sub>2</sub> e sequestro de carbono no solo.

**Palavras-chave:** Matéria orgânica do solo. Sequestro de carbono. Espectroscopia.

#### **Referências:**

- 1 LAL, R. Challenges and opportunities in soil organic matter research. **European Journal of Soil Science**, v. 60, n.2, p.158-169, 2009.
- 2 SANTOS, G. **Fundamentos da matéria orgânica do solo:** ecossistemas tropicais e subtropicais. 2nd ed. Porto Alegre: Metropole, 2008. 654 p.
- 3 LAL, R. Soil carbon sequestration impacts on global climate change and food security. **Science**, v. 304, n. 5677, p. 1623-1627, 2004.

## PG44

### Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida

CASTRO, L. A. de<sup>1</sup>; NAPOLITANO, R. de J.<sup>1</sup>

leonardo.castro@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Estudamos o processo de medida de bits quânticos (qubits) sujeitos a perturbações produzidas por um banho térmico bosônico, tal como requer uma descrição realística do processamento de informação quântica, que consiste de uma evolução temporal determinística com ruído seguida de uma medição sobre o sistema. Descrevemos o processo completo que envolve a perturbação e as medidas de forma unificada, através de uma equação mestra híbrida não-markoviana (1), dentro da aproximação em que as perturbações ambientais são suficientemente pequenas, como é esperado no caso de um computador quântico funcional. Tal equação mestra generalizada descreve simultaneamente a evolução do estado quântico e o processo de medida, tratado este último como tendo duração finita, o que permite o estudo da ação conjunta do aparato de medida e do ruído. Partindo de estudos anteriores de nosso grupo (2), examinamos como a medida de tempo finito pode alterar o processo natural de descoerência, exibindo a característica de proteger o sistema em certas situações. Combinamos esse estudo com a teoria quântica de correção de erros, de forma a determinar quais medidas de síndrome são adequadas para proteger o estado em cada situação. Levaremos em conta erros de dois tipos diferentes, além do efeito da temperatura do ambiente na medida. Comparando tais resultados com aqueles de um sistema em que as medidas de síndrome são executadas não continuamente, mas através de uma série de passos próximos entre si, veremos as diferenças entre essas duas abordagens para a medida. Finalmente, com o auxílio de resultados já obtidos no tópico da duração da medida (3), e a teoria de medidas fracas, proporemos meios experimentais de verificar se nossa descrição do aparato de medida é fiel à realidade.

**Palavras-chave:** Informação quântica. Medidas. Descoerência.

#### Referências:

- 1 BRASIL, C. A.; NAPOLITANO, R. de J. The master equation for the reduced open-system dynamics, including a Lindbladian description of finite-duration measurement. **European Physical Journal Plus**, v. 126, n. 10, p. 91, 2011. doi:10.1140/epjp/i2011-11091-y.
- 2 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. de J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, v. 84, n. 2, p. 022112, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.022112.
- 3 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. de J. How much time does a measurement take?. **Foundations of Physics**, v. 43, n. 5, p. 642, 2013. doi:10.1007/s10701-013-9707-7.

## PG45

### Septin 4: complexes and interactions

CAVALCANTE, N.<sup>1</sup>; GARRATT, R. C.<sup>1</sup>

nayara.cavalcante@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas are less well known cytoskeletal proteins, like others cytoskeletal proteins are able to polymerize in heterofilaments. They are able to stablish certain cell structures connected to specialized and differentiate cells like cilia cells, neurons, and spermatozoids. Those proteins were first identified in yeast mutant deficient cells. (1) Their name came from the septus where they were found on yeast division. There are five septins in yeast, two in *C. elegans* and fourteen in *Homo Sapiens*. The present project aims to address the structural arrangement of septin 4 in the filament with the possible different combination between them. Obtain better diffraction crystal and resolution could give detailed information about dynamic for those GTP binding proteins. Septin 4 complex combination will be expressed in bicistronic vector pRSFDuet and other compatible vectors in bacteria, purified and submitted to crystallization trials. Information gained from previous work lead us to prepare new septin 4 constructs with the aim to obtain Septin 4 structure alone. Other project part will address septin 4 interactions. Possible septin 4 partners were identified by yeast two hybrid (2) and need confirmation, which is planned to be done by pull down assays.

**Keywords:** Septin. GTP binding protein. Heterocomplex.

#### 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 NAKAHIRA, M. et al. A draft of the human septin interactome. **PLoS One**, v. 5, n. 11, p. e13799-1-e13799-12, Nov. 2010.

## PG46

### Expression and purification of (1-40) and (1-42) Alzheimer beta-amyloid peptides

CAVINI, Í. A.<sup>1</sup>; KALBITZER, H. R.<sup>2</sup>; MUNTE, C. E.<sup>1</sup>

claudia.munte@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Institute for Biophysics and Physical Biochemistry - University of Regensburg

Alzheimer's disease (AD) is a neurodegenerative disorder that afflicts more than 25 million people worldwide. Protein misfolding and subsequent aggregation into cytotoxic oligomers and, ultimately, amyloid plaques is an important event associated with neuron degeneration in AD patients. (1) The major component of senile plaques is the beta-amyloid (Abeta) peptide, produced through a proteolytic cleavage of the amyloid precursor protein (APP), a transmembrane protein. There are two predominating forms of Abeta peptide: Abeta(1-40) (less toxic, more common) and Abeta(1-42) (more toxic). The most *in vitro* studies of Abeta have been conducted with synthetic Abeta. However, it was found that synthetic Abeta does not present the same aggregation behavior than the recombinant one. (2) Thus chemical synthesis seems not to be a suitable method to obtain beta-amyloid peptides. This work aims the production of recombinant Abeta(1-40) and Abeta(1-42) peptides in order to study their structure and thermodynamics by solution high-pressure NMR spectroscopy. We use an expression construct based on a system previously reported. (i) two N-terminal hexahistidine-tags for the affinity purification; (ii) a segment comprising 19 repeats of the sequence NANP to increase the solubility of Abeta fusion protein; (iii) a modified TEV-protease cleavage site (ENLYFQ'D) and (iv) Abeta(1-40) or Abeta(1-42) peptide. TEV-protease maintains around 90% of proteolytic activity with D (aspartic acid) instead of G (glycine) or S (serine) in P1' position (3), allowing the release of Abeta peptide with the native sequence. Fusion protein was successfully expressed in *E. coli* BL21(DE3) and purified by immobilized metal ion affinity chromatography. At the moment, we are optimizing the cleavage protocol using a His6-TEV(S219V)-Arg5 also produced in our laboratory. The achievement of pure Abeta(1-40) and/or Abeta(1-42) peptide is the first step towards a deeper understanding of the *in vitro* mechanism of Abeta fibril formation.

**Keywords:** Alzheimer's disease. Recombinant protein. Abeta fibrillogenesis.

#### Referências:

1 HARDY, J.; SELKOE, D. J. The amyloid hypothesis of Alzheimer's disease: progress and problems on the road to therapeutics. **Science**, v. 297, p. 353-356, 2002. doi: 10.1126/science.1072994 .

2 FINDER, V. H.; VODOPIVEC, I.; NITSCH, R. M.; GLOCKSHUBER, R. The recombinant amyloid-beta peptide Abeta1-42 aggregates faster and is more neurotoxic than synthetic Abeta1-42. **Journal of**



**Molecular Biology**, v. 396, n.1, p. 9-18, 2010.

3 KAPUST, R. B.; TOZSR, J.; COPELAND, T. D.; WAUGH, D. S. The P1' specificity of tobacco etch virus protease. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, v. 294, n.5, p. 949-955, June 2002.

## PG47

# Propriedades termodinâmicas de nanoclusters com parallel tempering Monte Carlo

CEZAR, H. M.<sup>1</sup>; RONDINA, G. G.<sup>1</sup>; SILVA, J. L. F.<sup>2</sup>

henrique.musseli@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

O estudo da estabilidade de clusters de metais de transição é de grande relevância no campo de nano-ciência devido as diversas aplicações tecnológicas que esses materiais possuem. Para entender a estabilidade desses clusters com relação a temperatura, nós calculamos as propriedades termodinâmicas (como energia interna, calor específico, entre outras) de clusters de São-leonardenses (LJ) e platina (utilizando o potencial Quantum Sutton-Chen). Os cálculos foram realizados utilizando nossa implementação do método *Parallel Tempering Monte Carlo* (PTMC) (1), que fornece resultados mais precisos que simulações clássicas de Monte Carlo. Ainda como um avanço na metodologia, introduzimos o método de otimização do conjunto de temperaturas proposto por Katzgraber et al. (2) ao contexto de cálculos de propriedades de clusters. A análise dos resultados mostra uma mudança de fase dos clusters estudados, que pode ser observada principalmente através de picos que ocorrem no calor específico. Também notamos uma mudança de comportamento em outras curvas, como o numero de coordenação efetiva, energia interna e das variações do comprimento médio de ligação. Além disso, mostramos que o uso do método apresentado na Ref (2), pode melhorar ainda mais os resultados, produzindo menores barras de erro com o mesmo número de passos. Com o uso dessas metodologias, fomos capazes de reproduzir os resultados conhecidos para os clusters de LJ [3,4] e os clusters de platina com o Quantum Sutton-Chen [5].

**Palavras-chave:** Parallel tempering Monte Carlo. Termodinâmica. Nanoclusters.

### Referências:

- 1 HUKUSHIMA, K.; NEMOTO, K. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 65, n. 6, p.1604-1608, 1996. doi: 10.1143/JPSJ.65.
- 2 KATZGRABER, H. G.; TREBST, S.; HUSE, D. A.; TROYER, M. Feedback-optimized parallel tempering Monte Carlo. **Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment**, v. 3, p.03018, March 2006. doi:10.1088/1742-5468/2006/03/P03018.
- 3 LABASTIE, P.; WHETTEN, R. L. Statistical thermodynamics of the cluster solid-liquid transition. **Physical Review Letters**, v. 65, n.13, p.1567-1570, 1990.

## PG48

### A first-principles investigation of the atomic and electronic structure of $Pt_n$ , $Cu_n$ and $(PtCu)_n$ ( $n = 2 - 14$ ) clusters

CHAVES, A. S.<sup>1</sup>; RONDINA, G. G.<sup>1</sup>; PIOTROWSKI, M. J.<sup>2</sup>; SILVA, J. L. F. da<sup>3</sup>

aschaves@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Departamento de Física - UFPEL

<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Transition metal clusters have attracted great attention due to quantum confinement effects fostering the potential for many applications.(1) Moreover, the study of clusters can provide insights about the nanoparticles (NPs) formation. In particular, bimetallic NPs can present optimized properties, for example, PtCu NPs present enhanced oxygen reduction reaction activity when compared to pure Pt NPs. (2) However, this improvement is not well understood. Thus, an in-depth understanding of the compositional structure as well as growth mechanism of PtCu clusters arises as extreme importance to understand the improved catalytic activity of PtCu NPs. In this work, using first-principles calculations based on density functional theory within the generalized gradient approximation in the formulation proposed by Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) as implemented in the FHI-aims code (3), we investigate the atomic structure and electronic properties of anionic, cationic and neutral  $Pt_n$ ,  $Cu_n$  and  $(PtCu)_n$  clusters ( $n = 2-14$  atoms) for all compositions. The results show that  $Cu_n$  clusters are very influenced by shell effects and properties present an oscillatory-like behaviour. For  $Pt_n$  clusters, three structures were found more stable than in literature, for  $n = 7, 8$ , and  $12$  atoms. In general, these clusters present higher magnetic moments and smaller ECN and HOMO-LUMO gaps than  $Cu_n$  ones. Moreover, all magic  $Pt_n$  clusters (neutral and charged  $Pt_6$ ,  $Pt_{10}$  and  $Pt_{14}$ ) were accompanied by an enhanced  $s - d$  hybridization. Our Excess energy analysis for  $(PtCu)_n$  binary clusters show that the alloy formation is favorable for most cases. In particular,  $Pt(Cu)$ -rich binary clusters present almost the same properties as  $Pt_n(Cu_n)$ -clusters. For systems that shell closure is not satisfied, we found that the primary mechanisms for stabilization of these binary clusters are based on both: maximum number of hetero bonding and strain effects. Indeed, our atomic radial distribution analysis show that, in general, for the majority of most stable binary clusters, there are more Cu atoms closer to the gravity center in order to release strain energy. These results form a basis to understand the formation of greater particles such as 55-atoms core-shell PtCu NPs as well as basis to investigate ligand and support effects in these systems.

**Keywords:** Transition metal clusters. Binary clusters. Density functional theory.

#### Referências:

1 LU, Y.; CHEN, W. Sub-nanometre sized metal clusters: from synthetic challenges to the unique

property discoveries. **Chemical Society Review**, v.41, n.9, p.3594-3623, May 2012.

2 STRASSER, P. et.al. Lattice-strain control of the activity in dealloyed core-shell fuel cell catalysts. **Nature Chemistry**, v.2, p.454- 460, 2010.doi:10.1038/nchem.623.

3 BLUM, V. et.al. Ab initio molecular simulations with numeric atom-centered orbitals. **Computer Physics Communications**, v.180, n. 11, p.2175, Nov. 2009.

## PG49

### Dispositivos supercondutores e simulações quânticas

CHERUBIM, C. F.<sup>1</sup>; BRITO, F. B.<sup>1</sup>

cleverson.cherubim@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Simulações de sistemas físicos observados na natureza aparecem como ferramenta interessante e essencial na resolução e descrição destes. Em um contexto atual, os sistemas estudados são sistemas que seguem as regras da mecânica quântica tornando-se muito difícil e as vezes inviabilizando o uso de computadores clássicos em típicos processos de simulação. Tendo isso em mente e querendo contornar esse problema os físicos resolveram usar as características desses próprios sistemas quânticos para realizar essas simulações. Dentre estes sistemas um em particular e de extremo interesse para o desenvolvimento deste projeto são os circuitos supercondutores (estudado em nível teórico), que além de apresentarem flexibilidade de construção fornecem um bom ambiente para simulações de sistemas fora do equilíbrio. Neste trabalho nos propomos a estudar a implementação física de dispositivos supercondutores como simuladores quânticos, com especial atenção para a simulação de ambientes relativísticos, onde uma das possibilidades seria a simulação do famoso paradoxo de Klein.

**Palavras-chave:** Supercondutividade. Junções Josephson. Pares de Cooper.

#### Referências:

1 HOUCK, A. A.; TÜRECI, H. E.; KOCH, J. On-chip quantum simulation with superconducting circuits. **Nature Physics**, v. 8, p. 292-299, 2012. doi:10.1038/nphys2251.

## PG50

### Septina de *Chlamydomonas reinhardtii*: estudos com foco em sua expressão e função

CIOL, H.<sup>1</sup>; AVACA-CRUSCA, J. S<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P. U.<sup>1</sup>

heloisa.ciol@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

As septinas fazem parte de uma família de proteínas de ligação ao nucleotídeo guanina e já foram descritas em protozoários, fungos, animais e recentemente em algas. Estudos estruturais revelaram a formação de heterofilamentos de septinas, porém a formação desses heteropolímeros e sua relação com ligação e hidrólise de GTP é ainda incerta. (1) Além disso, a possibilidade de formação de homofilamentos de septinas nesses organismos e sua funcionalidade são controversas até o momento. A alga *Chlamydomonas reinhardtii* é um organismo modelo que divergiu a muito do ancestral comum a plantas e metazoários e possui uma única septina (CrSept), permitindo assim estudos voltados à existência e funcionalidade de homofilamentos destas proteínas. (2) Numa primeira abordagem, visando traçar a rede de interações proteicas da septina de *C. reinhardtii*, a técnica de duplo-híbrido em leveduras está sendo utilizada, com construções diversas da septina: (a) fusão da CrSept ao DNA binding domais (DBD) pela região N-terminal; (b) fusão da CrSept ao DBD pela região C-terminal; e (c) fusão apenas do domínio ligação em GTP da CrSept ao DBD pela região N-terminal. Os resultados iniciais mostraram que a construção (a) não foi eficiente na expressão da proteína de fusão e, portanto, inadequada ao duplo híbrido da septina de *C. reinhardtii*. No momento, análises das construções (b) e (c) estão em curso. Adicionalmente, os níveis de expressão gênica da CrSept por PCR quantitativo em tempo real estão sendo realizados, utilizando culturas sincronizadas de *C. reinhardtii* (12h de luz). Estes experimentos visam determinar se o pico de expressão de CrSept está correlacionado à divisão celular, um papel frequentemente observado para septinas. (3) Inicialmente, foram otimizadas as condições da reação e validados os oligonucleotídeos selecionados para o experimento. Num resultado preliminar, pode-se observar uma tendência de maior expressão gênica da septina duas horas após o início da fase escura, coincidente com o período de divisão celular. Novos ensaios estão em andamento a fim de validar estes resultados.

**Palavras-chave:** *Chlamydomonas reinhardtii*. Septina. Expressão gênica.

#### Referências:

- 1 SHEFFIELD, P. J.; OLIVER, C. J.; KREMER, B. E.; SHENG, S.; SHAO, Z.; MACARA, I. G. Borg/septin interactions and the assembly of mammalian septin heterodimers, trimers, and filaments. **Journal of Biological Chemistry**, v. 278, n. 5, p. 3483-3488, 2003. .
- 2 WŁOGA, D.; STRZYZEWSKA-JÓWKO, I.; GAERTIG, J.; JERKA-DZIADOSZ, M. Septins stabilize mitochondria in *Tetrahymena thermophila*. **Eukaryotic Cell**, v. 7, n. 8, p. 1373-1386, 2008.
- 3 YAMAZAKI, T.; OWARI, S.; OTA, S.; SUMIYA, N.; YAMAMOTO, M.; WATANABE, K.; NAGUMO,



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

T.; MIYAMURA, S., KAWANO, S. Localization and evolution of septins in algae. **The Plant Journal**, v. 74, n.4, p. 605-614, 2013.

## PG51

### A new analytical approximation based on 2 Gaussians for describing NMR signals in dipolar-coupling based experiments

COBO, M. F.<sup>1</sup>; AZEVEDO, E. R.<sup>1</sup>; REICHERT, D.<sup>2</sup>; SAALWAECHTER, K.<sup>2</sup>

marciofcobo@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Institute of Physics - Martin Luther Universitat - Germany

Molecular dynamics has a fundamental role in the function of many soft and solid organic materials. Among several examples, we cite: (i) the properties of polymers, such as brightness and resistance to shear, creep and tension; (ii) the physical properties of elastomers, like hardness, resilience, elongation at break. Furthermore, in biological systems, e.g. macromolecules like proteins, the molecular dynamics is often a critical element of their function. Among the techniques available to study molecular dynamics, the Nuclear Magnetic Resonance (NMR) is widely used due to many characteristics: (i) it is highly selective, being possible to distinguish different molecular segments and nuclei; (ii) the sensitive range to amplitude and rate of molecular motion is outstanding, existing NMR techniques able to study local rotations of molecular groups with amplitudes from few degrees to wider angles and with rates of motion from Hertz to Mega Hertz; (iii) there are several NMR pulse sequences, which allow one to study different motional processes, like local rotations of molecular groups, molecular flexibility, chemical exchange, molecular rotations and translational motions, using the same standard equipment. In order to quantify molecular dynamics parameters, such as amplitude and rate of motion, the development of a NMR technique is usually followed by the development of some simulation method. However, often such simulation methods are computationally costly and not trivial to program, because they numerically solve the Stochastic Liouville-von Neumann equation, to take into account the spin-nuclei interactions and the molecular motion effects. Thus, analytical approximations become interesting. In the present work, a new analytical approximation is proposed to describe the effect of local rotations of molecular groups on NMR signals of  $SI_n$  groups ( $CH_n$  and  $NH_n$ ), based upon the Anderson-Weiss approximation (AW), which originally approximates the local dipolar field to a single Gaussian whose second moment corresponds to the second moment of the original dipolar spectrum. (1) The approach is exemplified on Constant-Time Recoupled Dipolar Chemical-Shift Correlation ( $t_C$ -recDIPSHIFT) experiments. (2) By comparison of analytical  $t_C$ -recDIPSHIFT curves and numerical simulations, we show that for heteronuclear spin pairs (SI), the AW treatment assuming the usual single-Gaussian local field is accurate. However, the approximation fails for the case of  $SI_n$  systems for motional rates higher than few kHz. Based on earlier work of Terao et al., who proposed a decomposition of  $SI_n$  dipolar spectrum into  $2^n$  spin-pair-type patterns, we propose a new AW-approach based upon a double-Gaussian local field, since the  $2^n$  spin-pair-type patterns can be divided into two different sets of symmetric patterns. (3) We derive an analytical formula for  $t_C$ -recDIPSHIFT signals, and demonstrate its accuracy by comparison with numerical simulations of several motional geometries and rates, and with experimental results for a model sample. The new approach is not limited to the  $t_C$ -recDIPSHIFT experiment and should be of general use in dipolar-coupling based experiments



probing (partially) mobile  $SI_n$  molecular moieties.

**Keywords:** Nuclear magnetic resonance. Molecular dynamics. Anderson-Weiss analytical approximation.

**Referências:**

- 1 HONG, M.; GROSS, J. D.; RIENSTRA, C. M.; GRIFFIN, R. G.; KUMASHIRO, K. K.; SCHMIDT-ROHR, K. Coupling amplification in 2D MAS NMR and its application to torsion angle determination in peptides. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 129, n. 1, p. 85-92, 1997.
- 2 ANDERSON, P. W.; WEISS, P. R. Exchange narrowing in paramagnetic resonance. **Reviews of Modern Physics**, v. 25, n. 1, p. 269-276, 1953.
- 3 TERAOKA, T.; MIURA, H.; SAIKA, A. Dipolar SASS NMR spectroscopy: separation of heteronuclear dipolar powder patterns in rotating solids. **Journal of Chemical Physics**, v. 85, n. 7, p. 3816-3826, 1986.

## PG52

### Síntese e caracterização de perovskitas $Sr_{1-x}Cu_xTiO_3$ e $SrTi_{1-x}Cu_xO_3$ para catálise da reação de deslocamento água-gás

COLETTA, V. C.<sup>1</sup>; BERNARDI, M. I. B.<sup>1</sup>; ASSAF, E. M.<sup>2</sup>; MASTELARO, V. R.<sup>1</sup>

vitor.coletta@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

A reforma de hidrocarbonetos e álcoois tem atraído grande interesse para a produção de hidrogênio para células de combustível. Catalisadores comerciais para a etapa da reação shift apresentam deficiências como alta sensibilidade ao ambiente e baixa estabilidade térmica. (1) Por outro lado, óxidos com estrutura perovskita são considerados materiais promissores para esta aplicação. (2) É bem estabelecido que a adição de dopantes e o método de síntese utilizado podem influenciar de maneira significativa as propriedades catalíticas destes materiais. Assim, este projeto de Tese tem como objetivo avaliar a aplicação dos compostos  $Sr_{1-x}Cu_xTiO_3$  e  $SrTi_{1-x}Cu_xO_3$  ( $x = 0,03, 0,06, 0,09$ ) no processo de catálise da reação shift por meio da adição do íon cobre na matriz  $SrTiO_3$ . As amostras foram sintetizadas pelo método dos precursores poliméricos modificado, visando a obtenção de nanopartículas de maior área superficial em comparação com o método convencional. (3) A modificação consiste em um tratamento térmico de duas etapas: a primeira em uma atmosfera inerte para a decomposição do material orgânico em carbono, que envolve as nanopartículas limitando o crescimento destas, e a segunda em uma atmosfera oxidante para a remoção do carbono. Foi avaliado o uso de uma atmosfera redutora ( $Ar/15\% H_2$ ) substituindo uma atmosfera inerte ( $N_2$ ) na primeira etapa do tratamento. Para isso foram comparados dois tratamentos: um com  $Ar/15\% H_2$  e  $O_2$  e outro com  $N_2$  e  $O_2$  para a síntese de  $SrTiO_3$ . Experimentos de difração de raios-X, microscopia eletrônica de varredura e método Brunauer-Emmett-Teller (BET) mostraram que a atmosfera redutora possibilitou a obtenção de partículas de menor quantidade de fase carbonato na estrutura e maior área superficial, o que é vantajoso para a síntese de catalisadores. Por outro lado, fatores como os estados de oxidação influenciam na atividade catalítica. Considerando-se este fato, a influência da atmosfera nos estados de oxidação do cobre deverá ser avaliada futuramente através da técnica de XANES (espectroscopia de absorção de raios-X próximo à borda). Estão previstos também a realização de experimentos in-situ no LNLS.

**Palavras-chave:** Catálise. Perovskitas. Hidrogênio.

#### Referências:

- 1 RATNASAMY, C.; WAGNER, J. P. . Water-gas shift catalysis. **Catalysis Reviews: science and engineering**, v. 51, n. 3, p. 325-440, 2009.
- 2 MALUF, S. S. et al. Study of  $La_{2-x}Ca_xCuO_4$  perovskites for the low temperature water gas shift

reaction. **Applied Catalysis A**: general, v. 413, p. 85-93, 2012. doi: 10.1016/j.apcata.2011.10.047.

3 SILVA, L. F. et al. An improved method for preparation of SrTiO<sub>3</sub> nanoparticles. **Materials Chemistry and Physics**, v. 125, n. 1-2, p. 168-173, Jan. 2011.

## PG53

### Statistical analysis of the aging process in the fornix area of the rhesus monkeys brain

COMIN, C. H.<sup>1</sup>; COSTA, L. F.<sup>1</sup>

chcomin@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

We analyze the structure of myelinated axons in electron microscopy images of the fornix taken from rhesus monkeys' brains (1,2), using tools from the field of statistical physics. We consider images from six different specimens, divided into two groups. The first group includes three young females with ages from 6 to 8 years, while the second group is composed of old monkeys whose ages range from 25 to 32 years. We apply a feature selection approach (3) that allows us to discern the characteristics that best describe the differences observed upon aging. We find changes in the axon density, overall curvature and radial distribution function. Meaning that in order to correctly describe the aging process in the fornix area, we need to consider simultaneously macroscopic, shape and position characteristics. Moreover, we show that by considering these three characteristics together one can classify a sample as being young or old with more than 90% accuracy.

**Keywords:** Aging brain. Feature selection. Axon distribution.

#### Referências:

- 1 PETERS, A. et al. Are neurons lost from the primate cerebral cortex during normal aging?. **Cerebral Cortex**, v. 8, n. 4, p. 295-300, 1998.
- 2 PETERS, A.; SETHARES, C.; MOSS, M. B. How the primate fornix is affected by age. **Journal of Comparative Neurology**, v. 518, n. 19, p. 3962-3980, 2010.
- 3 GUYON, I.; ELISSEEFF, A. An introduction to variable and feature selection. **Journal of Machine Learning Research**, v. 3, p. 1157-1182, Mar. 2003.

## PG54

# Desenvolvimento de um genossensor de baixo custo e resposta rápida

CORRER, W.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTI, V.<sup>1</sup>

wcorrer@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O mapeamento de mutações em genes e a detecção rápida de parasitas são altamente desejáveis para diagnosticar doenças de maneira eficiente. Para a detecção de sequências de DNA, a técnica mais utilizada ainda é PCR (Polymerase Chain Reaction). Recentemente, genossensores estão surgindo como uma técnica alternativa ao PCR na detecção de sequências específicas. Genossensores são mais rápidos, necessitam de menor quantidade de amostras, possuem baixo limite de detecção e necessitam menos manipulação da amostra. Nosso objetivo nesse trabalho é desenvolver um genossensor de baixo custo e de resposta rápida para detecção do Human Papiloma Virus (HPV), utilizando-se medidas elétricas para detecção. Alguns tipos de HPV são fortemente correlacionados com o câncer do colo de útero. Entre estes tipos, HPV tipo 16 e HPV tipo 18 são responsáveis pela maioria dos casos de câncer de colo de útero. Moléculas de DNA contendo sequência complementar do alvo, chamadas de DNA-probe, são imobilizadas sobre a superfície de um eletrodo interdigitado.(1) Esse eletrodo é colocado em contato com a amostra, induzindo hibridização. Após a hibridização, sequências de DNA ligadas a nanopartículas de ouro (DNA-reporter) são colocadas em contato, promovendo uma alteração da resposta elétrica do eletrodo.

**Palavras-chave:** Biossensor. Genossensor. Sensor.

### Referências:

1 BEAUCAGE, S. L. . Strategies in the preparation of DNA oligonucleotide arrays for diagnostic applications. **Current Medicinal Chemistry**, v.8, n.10, p.1213-1244, 2001.

## PG55

### Electrical properties of P3HT:PCBM thin films used as active layers in organic photovoltaics

COUTINHO, D. J<sup>1</sup>; FARIA, R. M<sup>1</sup>

douglas@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The complete knowledge of electrical transport phenomena in organic photovoltaic devices is of crucial importance to improve the performance of organic solar cells (1). This work treats with investigation of charge carrier generation, dissociation-recombination phenomena and measurements of charge carrier mobilities in blended thin films composed by regio-regular Poly(3-hexylthiophene (rr-P3HT) and 1-(3-methoxycarbonyl)propyl-1-phenyl[6,6]C61 (PCBM). This blend forms a biphasic morphology in which the absorption occurs at the P3HT phase, generating excitons species, which diffuses towards the P3HT-PCBM interfaces where the dissociation in positive-negative charges carriers occurs. The transport is, then, ambipolar: electrons move along PCBM paths, and holes along P3HT ones. Finally, the carriers are collected by the electrodes. Using techniques as Photo-CELIV, impedanciometry, and decay current after a voltage pulse, that were carried out in photovoltaic devices of P3HT-PCBM thin films at different temperatures, we studied effects as recombination of first order, evolution of the charge carrier mobility along the active layer, and effects of semiconductor/metal conductor. These measurements were repeated for devices with different P3HT:PCBM molar ratios, and we developed a model to fit the devices photocurrent. The combination of these experimental measurements helped us to improve the solar cell performance.

**Palavras-chave:** Organic photovoltaic. Photocurrent. Electric properties.

#### Referências:

1 BLOM, P. W. M. et. al. Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells. **Physical Review B**, v. 72, n. 8, p. 085205-1-085205-9, 2005.

## PG56

### Spintrônica

CRUZ, A. R.<sup>1</sup>; MENEZES, J. C. E.<sup>1</sup>

adonai.cruz@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Sou estudante no início do programa de mestrado tendo ingressado no programa de pós-graduação do IFSC (Instituto de Física de São Carlos) no segundo semestre de 2013. Deverei neste primeiro ano me dedicar quase que exclusivamente às disciplinas obrigatórias (Estado Sólido B, Mecânica Estatística A, Electromagnetismo A e Mecânica Quântica B). Paralelamente, deverei iniciar a leitura da literatura internacional sobre temas relevantes e atuais em matéria condensada, e.g., Isolantes Topológicos e Fermions de Majorana. Estes deverão ser os tópicos do meu projeto de mestrado. O mesmo será definido neste primeiro ano. Dúvidas? Contate egues@ifsc.usp.br

**Palavras-chave:** Isolantes topológicos. Férmions de Majorana. Spintrônica.

#### Referências:

1 MICHETTI, P.; PENTEADO, P. H.; EGUES, J. C.; RECHER, P. Helical edge states in multiple topological mass domains. **Semiconductor Science and Technology**, v. 27, n. 12, p. 124007, 2012.

2 VERNEK, E.; PENTEADO, P.H.; SERIDONIO, A. C.; EGUES, J. C.. Majorana sneakily leaking into a quantum dot connected to a Kitaev wire. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1308.0092v2.pdf>>. Acesso em: 19 ago. 2013.

## PG57

# Análise termodinâmico de um gás ultrafrio em uma armadilha híbrida

CUEVAS, F. J. P.<sup>1</sup>; CASTILHO, P.<sup>1</sup>; FRITSCH, A.<sup>1</sup>; MUNIZ, S.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

jacksonpc@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Apesar de que a termodinâmica de gases quânticos tem sido um assunto vastamente estudado na literatura, os experimentos de gases aprisionados ultra-frios trouxeram novos desafios conceituais no que se refere à natureza das quantidades termodinâmicas. Sistemas que possuem um potencial confinante tem sido objeto da atenção na área da física atômica. Nesta classe de sistemas, a dependência espacial devido ao potencial, requer de um novo conjunto de variáveis globais. Romero-Rochín nas referências (1,2) demonstrou que um gás confinado em um potencial harmônico, a pressão e o volume, podem ser formalmente substituídos por novas variáveis análogas às usuais, conhecidas como parâmetros de pressão e volume. Estas novas quantidades termodinâmicas dependem do potencial externo, que em nosso caso corresponde a uma armadilha híbrida. O parâmetro de volume é uma função das frequências e o parâmetro de pressão é a variável conjugada. Usando estes novos parâmetros, é possível construir diagramas de fase (3), a partir dos quais é possível estudar transição da fase clássica para a fase quântica.

**Palavras-chave:** Termodinâmica. Condensação de Bose-Einstein. Variáveis globais.

### Referências:

- 1 ROMERO-ROCHÍN, V. Equation of state of an interacting bose gas confined by a harmonic trap: The role of the harmonic pressure. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 13, p. 130601-1-130601-4, Apr. 2005.
- 2 ROMERO-ROCHÍN, V.; BAGNATO, V. S. Thermodynamics of an ideal gas of bosons harmonically trapped: equation of state and susceptibilities. **Brazilian Journal of Physics**, v. 35, n. 3A, p. 607-613, Sept. 2005.
- 3 ROMERO-ROCHÍN, V.; SHIOZAKI, R. F.; CARACANHAS, M. A.; HENN, E. A. L.; MAGALHÃES, K. M. F.; ROATI, G.; BAGNATO V. S. Observation of Bose-Einstein condensation in an atomic trap in terms of macroscopic thermodynamic parameters. **Physical Review A**, v. 85, n. 2, p. 023632-1-023632-5, Feb. 2012.



## PG58

# Caracterização estrutural e funcional das proteínas TORC de *Trypanosoma cruzi*

DE GROOTE, M. C.<sup>1</sup>; REBOREDO, E. H.<sup>1</sup>

mdegroote@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As proteínas target of rapamycin kinase (TORC), formam diferentes complexos enzimáticos, responsável pelo controle da polimerização de actina (TORCII), e a síntese e degradação de proteínas e lipídios (TORCI), é portanto uma proteína envolvida no controle da replicação celular. (1) É formada por várias repetições HEAT (N-terminal), um domínio FAT, um FRB, um PI3/PI4 Quinase e um FATC (C-terminal). Essa proteína é conservada em vários organismos, sendo a de mamífero (mTOR) bastante estudada estrutural e bioquimicamente, e a utilizada como referência para a definição das regiões a serem clonadas. A atividade quinase é inibida por um complexo formado entre rapamicina e a proteína FK-506 binding protein 12KDa (FKBP-12) ao se ligar no domínio FRB (FK506 Rapamycin Binding domain). Sabe-se que esse complexo interage com a proteína TORCI, na grande maioria dos organismos, embora em alguns casos o contrário aconteça (se liga à TORCII). (2) O Objetivo do presente trabalho é, clonar a região de cada uma das proteínas TORC de *Trypanosoma cruzi* (*T.cruzi*), que sejam homólogas ao domínio FRB observado no cristal de mTOR (humana), expressar esses clones em *E.coli* e cristalizar cada complexo TORC-FKBP12-rapamicina. Inicialmente foi realizado, por homologia com a sequência de aminoácidos observado à partir de dados cristalográficos da TORC humana (pdb:4JSN) a escolha das regiões do domínio FRB das 3 proteínas TORC de *T.cruzi* (I, II e Likel). Até o presente momento foram obtidas por reação em cadeia da polimerase, à partir do DNA genômico de *T.cruzi* CL Brener as regiões de interesse e assim que confirmada a sequência, iniciarão os testes de expressão.

**Palavras-chave:** TORC. *Trypanosoma cruzi*. Expressão heteróloga de proteínas.

### Referências:

- 1 LAPLANTE, M.; SABATINI, D. M. mTOR signaling in growth control and disease. **Cell**, v. 149, n. 2, p. 274-293, 2012.
- 2 BARQUILLA, A.; CRESPO, J. L.; NAVARRO, M. Rapamycin inhibits trypanosome cell growth by preventing TOR complex 2 formation. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 105, n. 38, p. 14579-14584, 2008.
- 3 YANG, H. et al. mTOR kinase structure, mechanism and regulation. **Nature**, v. 497, n. 7448, p. 217-223, 2013.

## PG59

### Mirror characterizing for Cherenkov telescopes

DIPOLD, J.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

jessica.dipold@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Gamma rays are the most energetic form of light, billions of times more energetic than visible photons. Through the study of this kind of radiation, we are able to study phenomena like the emission from supernova explosions, pulsars and black holes, as well as gamma ray bursts, which are one of the great mysteries in modern astrophysics. The main mechanism utilized to astrophysical observations in gamma rays is Imaging Cherenkov Telescopes, which are able to image the trajectory of the gamma rays during its passage through the atmosphere by the means of the Cherenkov radiation. There are several current successful experiments, such as HESS (Namibia) and VERITAS (USA). Recently a new observatory started to be developed, the Cherenkov Telescope Array (CTA) (1) that will be able to observe sources with emission one order of magnitude lower flux than the present experiments. It will consist of several tens of Cherenkov telescopes with different sizes that will make possible the observation in many different regions of the gamma ray spectrum. The site where the observatory will be constructed is going to be chosen in the next months, and to do so many geographical and climatic analysis are necessary for each proposed site. One of the most relevant characteristics for this choice is the observation time, depending of the characteristic humidity of the site, which may lead to partial or complete covering of the sky through the formation of clouds, and condensation process in the telescope mirror surfaces. One of the proposed sites is located in Argentina, close to the city of San Antonio de Los Cobres, north of the country. It was built an outdoor test facility (2) in this site in order to monitor the optical and mechanical properties of two hexagonal 1,5 m mirror facets, from the Commissariat d'Energie Atomique, France, and one 50x50cm mirror produced in São Carlos by Opto Eletronica . The mirrors are exposed to the local atmospheric conditions for a given period of time. The reflective surface is watched remotely by cameras that take pictures during the night, which provides us with data to observe daily changes in the quality of the mirrors surfaces as well as if they condensate in that period. To analyze the changes in optical properties we utilize a portable 2f system (3), built in Instituto de Física de São Carlos, which observes the reflected light from a point source that should be smaller than the mirror PSF (point spread function). In this study, we built the portable 2f system taken to San Antonio de los Cobres for testing and are also making picture analysis to study the condensation of the mirrors. Through these, we intend to show the viability of the construction of the CTA observatory at San Antonio de los Cobres and develop a model for mirror condensation that can be used to the other sites as well.

**Palavras-chave:** Gamma ray astronomy. Cherenkov telescopes. Mirrors.

#### Referências:

1 ACHARYA, B. S. et al. Introducing the CTA concept. **Astroparticle Physics**, v. 43, p. 3-18, 2013.

2 MEDINA, M. C . An outdoor test facility for the Cherenkov telescopes array mirrors. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1307.4965v1.pdf>>. Acesso em: 8 ago. 2013.

3 BRUN, P. et al. Composite mirror facets for ground based gamma ray astronomy. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A: accelerators, spectrometers, detectors and associated equipment**, v. 714, p. 58-66, 2013. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1301.6988v2.pdf>>. Acesso em: 20 ago. 2013.

## PG60

### Refratômetro por reflexão total interna

DOMENEGUETI, J. F. M.<sup>1</sup>; ZILIO, S. C.<sup>1</sup>

jose.domenegueti@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Métodos e instrumentos para a realização de medidas mais precisas e de forma mais simples são necessários em diversos setores, que vão desde a indústria de alimentos até os laboratórios de pesquisa e desenvolvimento. Uma particular grandeza física de fundamental importância em vários desses segmentos é o índice de refração (IR), pois, guarda informações muito importantes a respeito das propriedades ópticas de um sistema. Dentre os vários métodos para medirmos o IR de um meio, aqueles baseados na determinação do ângulo crítico via reflexão total interna tem sido amplamente empregados em refratometria diferencial, particularmente quando são tratadas amostras túrbidas ou absorvedoras. (1) No presente trabalho propomos a utilização de uma técnica recentemente apresentada para a determinação do ângulo crítico (2) com o intuito de desenvolver um refratômetro barato, preciso e de simples implementação para a medida do IR de amostras líquidas e gasosas. No dispositivo em desenvolvimento fazemos uso da diferença de fase entre as componentes paralela e perpendicular de uma fonte polarizada para produzir um perfil de intensidade no qual o ângulo crítico é facilmente identificado. Nos experimentos realizados até o momento pudemos constatar que o proposto método é sensível a variações da ordem de  $10^{-5}$  no IR, sendo, portando, uma boa alternativa aos instrumentos atualmente utilizados.

**Palavras-chave:** Sensores ópticos. Refratômetro. Ângulo crítico.

#### Referências:

- 1 MEETEN, G. H.; NORTH, A. N. Refractive index measurement of absorbing and turbid fluids by reflection near the critical angle. **Measurement Science and Technology**, v. 6, n. 2, p. 214-221, 1995.
- 2 ZILIO, S. C. A simple method to measure critical angles for high-sensitivity differential refractometry. **Optics Express**, v. 20, n. 2, p. 1862-1867, 2012.

## PG61

### Biochemical and biophysical studies of specific proteins recruited for SL trans splicing in *Trypanosoma brucei*

E SILVA, I. R.<sup>1</sup>; DA SILVA, M. T. A.<sup>1</sup>; BORALII, C. M. S.<sup>1</sup>; SOUZA, G. E.<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

ivan.usp@hotmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Molecular biology of trypanosomatids has been a research focus for decades since some of these parasites, including *Trypanosoma brucei*, *Trypanosoma cruzi* and *Leishmania major*, cause severe human diseases. (1) The discovery of spliced leader (SL) trans splicing in *T. brucei* established a key difference between parasites and hosts. In contrast with the pre-mRNA cis splicing observed in their hosts, SL trans-splicing is responsible for resolving polycistronic mRNA precursors in individual mature 5'-capped mRNAs, together with 3'-polyadenylation. Both processes are catalyzed by the spliceosome machinery assembled by small nuclear ribonucleoproteins (snRNPs) U1, U2, U4, U5 and U6 that consist of structural RNAs (snRNAs), a common set of seven Sm proteins (B, D3, D2, D1, E, F, and G) and snRNPs specific proteins (1). The core of Sm proteins varies in *T. brucei*, in which SmB and SmD3 proteins are replaced by Sm16.5k and Sm15k respectively in U2 snRNPs and SmD3 protein is substituted by Ssm4 in U4 snRNPs. (2) Other variations are also observed among snRNPs specific proteins such as U5-200k, which has helicase and ATPase function in the formation of the catalytic spliceosome. (3) Although conserved in trypanosomatids and their hosts, U5-200k lacks the C-terminal Sec63 domain in *T. brucei*, which is believed to recruit other splicing factors (3). In order to analyze the Sm cores in *T. brucei*, we first employed homology modeling techniques. Three-dimensional atomic models of Sm proteins revealed contact surfaces responsible for Sm cores formation. Unfortunately, Ssm4 do not share suitable amino acid sequence identity with other homologous protein with known 3D structure for homology modeling. To better investigate Sm cores assemblies, we co-expressed the sub-complexes SmD3/SmB, SmE/SmF/SmG, SmD1/SmD2 and Sm16.5k/Sm15k using pEQ30 (Qiagen) expression vector in *E. coli* SG13009 strain. We also cloned the open reading frame for proteins Ssm4 and SmB in pETDuet-1 (Novagen) expression vector and co-expressed the resulting sub-complex. The co-expressed sub-complexes were co-purified by nickel affinity chromatography (HiTrap IMAC HP - Qiagen) followed by size exclusion chromatography in SUPEROSE 12 10/300 (GE). SnRNAs were produced by RNA polymerase in vitro transcription using specific oligonucleotides. Sm cores in vitro reconstitution in the presence and in the absence of snRNAs are being analyzed by size exclusion chromatography, native gel electrophoresis, dynamic light scattering and small angle X-ray scattering. Protein crystallography will be used to better understand the Sm core variation at atomic level. In addition to the structural studies with Sm cores, we are also investigating the function of the U5-200k protein. Our objective is to produce a tagged protein in *T. brucei* under natural conditions and identify possible U5-200k interaction partners using the technique called ProtC-TEV-ProtA-tag tandem affinity purification. We are now cloning different truncated constructions of U5-200k in pC-PTP-neo vector designed to homologous recombination in *T. brucei* genome. Our results will give new insights into the mechanism of SL trans splicing in trypanosomatids.

**Palavras-chave:** Trans splicing. *Trypanosoma brucei*. Sm core.

**Referências:**

- 1 GUNZL, A. The pre-mRNA splicing machinery of Trypanosomes: complex or simplified?. **Eukaryotic Cell**, v. 9, n. 8, p.1159-1170, 2010.
- 2 WANG, Z. et al. Sm core variation in spliceosomal small nuclear ribonucleoproteins from *Trypanosoma brucei*. **The EMBO Journal**, v. 25, n.2, p. 4513-4523, 2006.
- 3 DA SILVA, M. T. A. et al. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memorias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 106, n. 2, p. 130-138, 2011.

## PG62

### Ozone gas sensor based on $La_xSr_{1-x}Ti_yFe_{1-y}O_3$ thin films

ESCANHOELA JUNIOR, C. A.<sup>1</sup>; SILVA, L. F.<sup>1</sup>; BERNARDI, M. I. B.<sup>1</sup>; MASTELARO, V. R.<sup>1</sup>

escanhoela@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Due to the introduction of more stringent regulations governing air-pollution, it becomes important to focus research on the development of low-cost gas sensors in order to access applications where the use of conventional analytical systems is prohibitively expensive. (1) Strontium titanate ( $SrTiO_3$ , ST) has been extensively explored as gas sensors due the facility to incorporate different ions in its structure. The substitution of Sr or Ti atoms by monovalent or trivalent ions affect directly its physical and chemical properties leading to an improvement in its characteristics of interest. (2) The aim of this study was the synthesis and characterization of  $La_xSr_{1-x}Ti_yFe_{1-y}O_3$  (LSTF;  $0 \leq x \leq 0.05$ ;  $y = 0.0 \leq x \leq 0.15$ , %mol) in the powder and thin film forms, in order to verify the effect of lanthanum and iron substitution on the physical properties of ST. First, the temperature of total elimination of the organic compounds on nanostructured powder samples were determined by termogravimetric analysis (TG) and differential thermal analysis (DTA). X-ray diffraction (XRD) measurements of powder samples after a heat treatment showed that all compositions present only a single cubic phase similar to the  $SrTiO_3$  compound. The XANES spectra at Ti K-edge of LSTF samples as a function of La and Fe showed that Ti local symmetry is not affected by the substitutions. Through scan electronic microscopy (FEG-SEM) it was found that the particles presents a high degree of agglomeration and that the morphology is not affected by with addition of La and Fe.  $La_xSr_{1-x}Ti_yFe_{1-y}O_3$  thin films measuring 70 nm of thickness were obtained by using electron beam evaporation technique. The influence of La and Fe in the surface morphology of the thin films was investigated by atomic force microscopy (AFM). The analysis of AFM images shows that the films are homogeneous over an area up to  $20 \mu m^2$ . The electrical characteristics of the thin films as a function of sample composition and temperature were evaluated regarding the response to  $O_3$  gas at 250 °C. The resistance measurements at different amounts of ozone gas showed a lower sensitivity of these thin films to ozone gas and as well as a slower recovery time. Consequently, the introduction of La and Fe on the ST matrix does not improve the properties of this material regarding its application as ozone gas sensor.

**Palavras-chave:** Perovskite. Gas sensor. Thin film.

#### Referências:

- 1 SAUTER, D.; WEIMAR, U.; NOETZEL, G.; MITROVICS, J.; GOPEL, W. Development of modular ozone sensor system for application in practical use. **Sensor and Actuators B**, v. 69, n. 1-2, p. 1-9, 2000.
- 2 FERGUS, J. W. Perovskite oxides for semiconductor-based gas sensors. **Sensor and Actuators B**, v. 123, n. 2, p. 1169-1179, 2007.

## PG63

### Transformada wavelet aplicada na extração das características do ruído emitido pela caneta ao assinar

ESCOLA, J. P. L.<sup>1</sup>; GUIDO, R. C.<sup>1</sup>

jpescola@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A Biometria é o processo de validação do ser humano por meio de suas características, sejam elas fisiológicas ou comportamentais. (1) A assinatura é o processo comumente utilizado quando for necessário validar uma pessoa em documentos ou registros formais. O processamento digital de sinais (PDS) busca manipular e interpretar características de sinais como áudio e voz. (2, 3) Este artigo aborda a manipulação do ruído emitido pela caneta durante o processo de assinatura de um indivíduo, fazendo deste um recurso adicional de validação biométrica utilizando as técnicas de PDS. Com o intuito de capturar o ruído emitido pela caneta ao assinar, foi desenvolvido um protótipo de uma caneta com um microfone embutido. Um conjunto de sinais é, então, submetido a um algoritmo que armazena as características do conjunto de sinais utilizando uma rede neural artificial, que é responsável por classificar os bancos de assinaturas dos voluntários. Com o sistema treinado, assinaturas diferentes dos mesmos indivíduos são submetidas ao sistema que faz uma comparação e retorna o código do indivíduo com características mais próximas. Os resultados do trabalho chegaram a uma margem de 90% de acertos durante a fase de testes.

**Palavras-chave:** Wavelets. Biometria. Processamento de sinais.

#### Referências:

- 1 BRAVO, J. C. L. **Autenticação pessoal baseada no som da assinatura**. 2006. 113 p. Dissertação (Mestrado) - Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.
- 2 BARBON JUNIOR, S. **Dynamic time warping baseado na transformada wavelet**. 2007. 113 p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.
- 3 LYONS, R. G. **Understanding digital signal processing**. 2nd. ed. New Jersey: Prentice Hall, 2004.



## PG64

### The influence of the organosolv and hydrothermal pretreatment in bagasse sugarcane on the increases significantly ethanol production

ESPIRITO SANTO, M. C.<sup>1</sup>; NOGUEIRA, A. R. S.<sup>2</sup>; LIMA, M. A.<sup>1</sup>; MORIM, M. A. S.<sup>1</sup>; SELEGHIM JUNIOR, P.<sup>1</sup>; CURVELO, A. A. S.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>; AZEVEDO, E. R.<sup>1</sup>

melissaespiritosanto@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Pretreatment technologies of sugarcane bagasse are increasingly on research mostly in Brazil, because there are much use of this feedstock in bioethanol production. The goal of any pretreatment technology is to unstructured cell wall for better this process. (1) However, treatments efficient with low costs are still under investigation for application in sugarcane industry on pilot scale. In this study, we analyzed changes in morphology and chemical composition of sugarcane bagasse, in the same particle size, by a delignification process with liquid hot water or hydrothermal and organic solvent, ethanol 50%. Samples before and after each pretreatment condition were studied by determination of chemistry characterization, enzymatic hydrolysis and transmission electron microscopy, wich were considered detail morphological. The organosolv pretreatment and it in association with hydrothermal showed bests results, what should demonstrated that our analyses are affirmatives, beyond are complementary, because morphological changes resulted in better enzymatic hydrolysis. (2) Sensitivity analyses using High performance anion exchange chromatography with pulsed amperometric detection (HPAE-PAD) on the process of chemical compositon and enzymatic hydrolysis showed that organosolv pretreatment increased up 60% enzyme access to cellulose that can be converted in ethanol, compared with untreated sugarcane bagasse. We believe that the pretreatments conditions, present here are accessible for any chemistry industry of sugarcane, because are not depend high technology. In addition the methods that were proposed, showed thorough information about pretreatments samples, which provide a more accurate to understand the morphological effects and its influence on the enhanced hydrolysis results.

**Keywords:** Bioethanol. Biomass. Treatment.

#### Referências:

1 MOSIER, N. et al. Features of promising technologies for pretreatment of lignocellulosic biomass. **Bioresource Technology**, v. 96, n. 6, p. 673-686, Apr. 2005.

2 REZENDE, C. A. et al. Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility. **Biotechnology for biofuels**, v. 4, n. 54-1-54-8, Nov. 2011.

## PG65

### **Expression, purification, crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of the Pectinases from the sugar cane weevil, *Sphenophorus levis*.**

EVANGELISTA, D. E.<sup>1</sup>; GODOY, A. S. de<sup>1</sup>

daniloe@hotmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

Pectin is the major component of the middle lamella, contributing to the structure support and protection of plant tissues. Pectin is mainly composed of galacturonic acid units linked by  $\alpha$ -1,4 glycosidic bonds, which is partially esterified by methyl groups. (1) This polysaccharide is naturally degraded by pectinases, such as the Pectin-methylesterase, which removes methyl-ester groups, and the Endo-polygalacturonase that randomly cleaves the  $\alpha$ -1,4 bonds. (1) Pectinases are involved in the plant cell wall development, micro-organisms enzymatic arsenal used to attack plants and have also a wide range of application in the industrial sector. (1) Recently, studies of a cDNA library from *Sphenophorus levis*, the Sugar cane Weevil, indicate the presence of one Pectin-methylesterase and an Endo-polygalacturonase genes, which were named SI-PME and SL-EndoPG, respectively. Considering the importance of these enzymes in biological studies and their several industrial applications, we promote X-rays diffraction studies of their recombinant enzymes. The ORFs were linked into the pPICZa expression vectors and used to transform competent *Pichia pastoris*. The recombinant clones produced a large amount of the recombinant enzymes, which were purified by affinity chromatography in a nickel column. The recombinant enzymes activity was confirmed by halos of consumed substrate in a matrix gel containing 1% esterified-polygalacturonic acid and samples of the enzymes. The sitting-drop vapour-diffusion method was used to crystallization screens with commercial kits. After 10 days, crystals were observed, only for SI-PME, in the Index kit with 25% (w/v) PEG 3,350, 0.1 M citric acid pH 3.5 as a crystallization solution and (1:1 v/v) protein-to-crystallization solution ratio. Data were collected at Bruker APEX DUO single-crystal diffractometer system equipped with KAPPA goniometer and APEX II CCD detector. The exposure time was set to 20 seconds for data collection. The point group determination and data collection strategy were performed with PROTEUM2 software. Data was integrated to 2.1 Å with SAINT and scaled with SADABS. Data statistics collection and space group determination were obtained with XPREP. The solvent content was calculated using Matthews coefficient, as implemented in phenix.xtriage. Protein was solved with Phaser through an ensemble of models generated with phenix.ensemble and phenix.sculptor (2). The data set was indexed in the monoclinic C2space group. After integration, reflections were scaled and merged 22,383 total reflections, with a total Rmerge of 5.2%: the completeness of data set was 96.6%. Based on the systematic absences, the space group was found has C121, with unit-cell parameters  $a=122.181$ ,  $b=82.213$ ,  $c=41.176$  and  $B=97.48$ . Assuming one protein molecule in the asymmetric unit cell, the Matthews coefficient was calculated as 2.71 Å<sup>3</sup> Da<sup>-1</sup>. This corresponds to 54.7% of solvent content in the crystal. (3) The protein was solved with Phaser using an ensemble of models based on the structures with PDB ids: 3GRH, 1XG2, 1GQ8 and 3UW0 all selected by HHpred. This process resulted in a unique solution, with satisfactory statistics in the given space group. Data refinement and

model building is in progress.

**Keywords:** Pectinases. *Sphenophorus levis*. X-rays diffraction studies.

**Referências:**

- 1 KASHYAP, D. R.; VOHRA, P. K.; CHOPRA, S.; TEWARI, R. Applications of pectinases in the commercial sector: a review. **Bioresource Technology**. v. 77, n.3, p. 215-227, 2001.
- 2 ADAMS, P. D. et al. PHENIX: a comprehensive Python-based system for macromolecular structure solution. **Acta Crystallographica Section D**. v. 66, pt.2, p. 213-221, 2010.
- 3 MATTHEWS, B. W. . Solvent content of protein crystals. **Journal of Molecular Biology**. v. 33, n.2, p. 491-497, April 1968.

## PG66

### Caracterização molecular e estrutural das selenoproteínas de *Trypanosoma brucei*

EVANGELISTA, J. P.<sup>1</sup>; MORAES, I.<sup>2</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

jaque@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Membrane Protein Laboratory - Diamond Light Source Ltd - Harwell Science and Innovation Campus - Didcot - United Kingdom.

O aminoácido selenocisteína (Sec) representa a principal forma biológica de selênio e o repertório completo de genes envolvidos em sua via de síntese em protozoários não é totalmente conhecido. Foram identificadas três selenoproteínas em Kinetoplastidas, sendo elas: SelT, SelK e SelTryp. (1) Para entender suas funções, estudos com estas selenoproteínas foram planejados. Os genes *selk*, *selt* e *seltryp* foram sintetizados pela empresa GenScript e foram clonados no vetor pUC57. Nós subclonamos em vetores pET e posteriormente digerimos, ligamos e transformamos em células de *Escherichia coli* para a expressão proteica. Para as proteínas SelK e SelTryp o protocolo de expressão não apresentou um resultado satisfatório para dar continuidade aos experimentos planejados. Já a proteína SelT, que possui 3 regiões transmembrânicas, é expressa em *E. coli* na fração solúvel e sua purificação consiste em duas resinas: afinidade por níquel e exclusão molecular Superdex 200. Ensaio realizado no SEC-MALLS mostraram uma estabilidade do complexo proteína-detergente e foi possível produzir anticorpos policlonais desta proteína. Experimentos de localização celular encontram-se em andamento.

**Palavras-chave:** Selenocisteína. Selenoproteínas. Kinetoplastidas.

#### Referências:

1 LOBANOV, A. V.; HATFIELD, D. L.; GLADYSHEV, V. M. Eukaryotic selenoproteins and selenoproteomes. **Biochimica et Biophysica Acta**, v. 1790, n. 11, p. 1424-1428, Nov. 2009.

## PG67

# Propriedades naturais das estruturas sociais: aspectos topológicos e linguísticos

FABBRI, R.<sup>1</sup>; COSTA, L. F.<sup>1</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>

renato.fabbri@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Em redes sociais, pouco está estabelecido sobre a influência da topologia, dos participantes em redes de amizades ou de interações, nas produções linguísticas dos seus agentes.(1-2) Esta pesquisa propõe um passo sistemático nesta direção através da análise de listas de emails e suas evoluções temporais.(3) A caracterização quantitativa da rede sustenta tipificações dos agentes por setor da rede, com estruturas e produções textuais que refletem os papéis sociais desempenhados. O trabalho visa um repertório aberto de conhecimentos e tecnologias para análise e reflexão sobre as redes sociais virtuais. A ênfase na documentação sobre estes conhecimentos e tecnologias, e com estes recursos, tem facilitado contribuições. Neste contexto, há contribuições artísticas (Pedro Rocha, Daniel Penalva, Vilson Vieira), civis (labMacambira.sf.net, Rede Transmidias, Adorno não é Enfeite), governamentais (SG/PR, MEC) e acadêmicas (IFSC/USP, NILC-ICMC/USP, IEA/USP, CCMH/UFABC, IPRJ/UERJ, IFT/UNESP) ao trabalho nas formas de textos, imagens, animações, vídeos, visitas, deslocamentos, reuniões, um evento e um experimento aberto de difusão de conteúdos. Dentre os resultados já alcançados, há scripts para visualizações e observações estatísticas automáticas, além de escritos para uso interno dos pesquisadores e para publicação.

**Palavras-chave:** Análise de redes sociais. Redes complexas. Processamento de linguagem natural.

### Referências:

- 1 BIRD, C.; GOURLEY, A.; DEVANBU, P.; GERTZ, M.; SWAMINATHAN, A. Mining email social networks. In:INTERNATIONAL WORKSHOP ON MINING SOFTWARE REPOSITORIES,6,2006, New York,USA.**Proceedings...** New York: ACM, 2006. p137-143.
- 2 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, p167-242, 2007.
- 3 PALLA, G.; BARABASI, A.; VICSEK, T. Quantifying social group evolution. **Nature**, v.446, p.664-667, Feb. 2007. doi:10.1038/nature05670.

## PG68

### Optical generation of spin imbalance in Si nanowires

FARIA JUNIOR, P. E.<sup>1</sup>; SIPAHI, G. M.<sup>2</sup>; ZUTIC, I.<sup>3</sup>

fariajunior.pe@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP/ University at Buffalo - SUNY, USA

<sup>3</sup>University at Buffalo - SUNY, USA

In addition to its central role in conventional electronics, silicon has spin-dependent properties (such as long spin relaxation and decoherence times) that could be particularly useful in spin-based quantum-information processing and spintronics. (1) Unfortunately, its indirect band gap precludes using the standard optical methods of spin injection and detection in semiconductors. However, this obstacle can be removed in Si nanowires which display direct band gap and could also serve as spin interconnects by modulating spin polarization. (2) Using the k.p method we study the feasibility of optical spin injection in Si nanowires and quantify the degree of spin polarization, given in terms of carriers and spin injection rates. (3) We observed total spin polarization of carriers around the gap. Also, due to different symmetries of valence sub-band states, our results showed opposite contributions for the degree of spin polarization. Supported by FAPESP (grant #2012/05618-0) and CNPq, US ONR, NSF- NRI, NSF-ECCS and DOE-BES.

**Keywords:** Optical transitions. Spin injection. Silicon nanowire.

#### Referências:

- 1 ZUTIC, I.; FABIAN, J.; SARMA, S. D. Spintronics: fundamentals and applications. **Reviews of Modern Physics**, v. 76, n. 2, p. 323-410, 2004.
- 2 DERY, H.; SONG, Y.; LI, P.; ZUTIC, I. Silicon spin communication. **Applied Physics Letters**, v. 99, n. 8, p. 082502-1-082502-3, 2011.
- 3 RIOUX, J.; SIPE, J. E. . Optical injection processes in semiconductors. **Physica E**, v. 45, p. 1-15, Aug. 2012. doi: doi.org/10.1016/j.physe.2012.07.004.

## PG69

### Nanostructured biosensors for the early dengue diagnosis

FARIA, H. A. M.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

henrique.fisica@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Dengue is the most important viral disease transmitted by mosquitoes. During your cycle infection, Dengue may manifest asymptomatic or progress to severe cases. In the last 50 years the worldwide incidence has raised 30-fold with estimated 50 million infections per year occurring in more than 100 countries. There are no licensed vaccines and specific therapeutics. Among the various methodologies used for genetic diagnosis, the use of PCR-based methodologies are the most suited ones. (1) However, due to the high cost and complexity of the equipment employed in PCR analyses, it is not often used in early diagnosis. Biosensors are a promising alternative to meet the need of early diagnosis. This PhD project aims at developing electrochemical biosensors for detecting specific genome sequences related to different types of dengue virus using brush-type polymers (Polymer Brushes - PBs). The biosensors proposed here combine self-assembling nanostructures (2), with polymer brushes to provide a fast response time and simplicity required for diagnosis of dengue fever. (3)

**Keywords:** Biosensor. Dengue. Nanostructures.

#### Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Global strategy for dengue prevention and control 2012-2020.** Disponível em:

<[http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/75303/1/9789241504034\\_eng.pdf](http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/75303/1/9789241504034_eng.pdf)>. Acesso em: 08 ago. 2013.

2 CRESPILO, F. N.; ZUCOLOTTO, V.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; NART, F.C. Electrochemistry of Layer-by-Layer Films: a review. **International Journal of Electrochemical Science**, v. 1, p. 194-214, 2006.

3 OZSOZ, M. **Electrochemical DNA biosensors.** Singapore: Pan Stanford Publishing, 2012.

## PG70

# Observation of classical bifurcation in a quadrupolar NMR system

FERREIRA, A. G. A.<sup>1</sup>; ESTRADA, R. A.<sup>2</sup>; SARTHOUR JUNIOR, R. S.<sup>3</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, I. S.<sup>3</sup>; RODITI, I.<sup>3</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

avatar@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária - Embrapa Solos - Rio de Janeiro - RJ

<sup>3</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF - Rio de Janeiro - RJ

The investigation of classical bifurcation on quantum systems has been the focus of many theoretical and experimental studies. This behavior is typically addressed in the context of Bose-Einstein condensates (BEC) systems. Bifurcation is a signature of phase transition between different regimes, thus the interest in such phenomena. (1) In this work, we use a quadrupolar NMR system based on  $^{133}\text{Cs}$  nuclei with spin  $I = \frac{7}{2}$  to study the bifurcation behavior in analogy to what happens in BEC systems. A two-mode BEC can be described via the Schwinger pseudo-spin representation and entirely mapped onto a quadrupolar NMR Hamiltonian, enabling us to study this type of dynamics using NMR quantum information processing tools. For observing the classical bifurcation we used a lyotropic liquid crystal sample composed of cesium-pentadecafluorooctanoate. The  $^{133}\text{Cs}$  NMR experiments were performed using specially designed radio-frequency pulses in order to implement spin coherent states as initial states. Next, appropriate evolutions were implemented to achieve the desired linear or non-linear regime. Finally, the read out of the quantum state was done using the quantum state tomography procedure. (2) The experiments were performed on a Varian 500 MHz (11.7 T) spectrometer at 25 °C. We observed the dynamics transition of the system between a linear to a nonlinear regime. This evolution is interpreted using the Josephson Junction model, which is commonly applied in superconductivity. We achieved that behavior when we varied one of the quadrupolar Hamiltonian parameters. The change in the system dynamics lead to a supercritical pitchfork bifurcation that we were able to evaluate and to show the quantum control in the NMR spin scenario. (3)

**Keywords:** Quadrupolar NMR. Nuclear spin coherent states. Classical bifurcation.

### Referências:

1 ZIBOLD, T.; NICKLAS, E.; GROSS, C.; OBERTHALER, M. K. Classical bifurcation at the transition from Rabi to Josephson dynamics. **Physical Review Letters** **A**, v. 105, n. 20, p. 204101-1-204101-4, 2010.

2 ARAUJO-FERREIRA, A. G.; BRASIL, C. A.; SOARES-PINTO, D. O.; AZEVEDO, E. R.; BONAGAMBA, T. J.; TELES, J. Quantum state tomography and quantum logical operations in a



three qubits NMR quadrupolar system. **International Journal of Quantum Information**, v. 10, n. 2, p. 1250016-1-1250016-20, Mar. 2012.

3 ARAUJO-FERREIRA, A. G.; AUCCAISE, R.; SARTHOUR, R. S.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J.; RODITI, I. Classical bifurcation in a quadrupolar NMR system. **Physical Review A**, v. 87, n. 5, p. 053605-1-053605-5, May 2013.

## PG71

### Imunossensores potenciométricos para a detecção de doenças negligenciadas

FIGUEIREDO, A.<sup>1</sup>; SANTOS, J. F.<sup>1</sup>; VIEIRA, N. C. S.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTI, V.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

afigueiredo17@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos grandes obstáculos para os chamados países em desenvolvimento são as conhecidas doenças negligenciadas, que afetam severamente a população de áreas tropicais e subtropicais. Este conjunto de doenças prevalece em condições de pobreza, contribuindo para a manutenção do quadro de desigualdades. Constitui este grupo doenças como a dengue, doença de Chagas, esquistossomose, hanseníase, leishmaniose, malária, tuberculose, entre outras. (1) Segundo dados da Organização Mundial de Saúde (OMS), mais de um bilhão de pessoas estão infectadas com uma ou mais doenças negligenciadas, devido principalmente a condições sanitárias precárias, como água contaminada e más condições de habitação. (1) O desenvolvimento de métodos diagnósticos no que se refere as doenças negligenciadas são de grande interesse, logo, visando a alteração deste quadro, propomos o desenvolvimento de imunossensores capazes de diagnosticar algumas destas doenças, por exemplo dengue, doença de Chagas e malária. Imunossensores constituem uma classe de biossensores baseados na afinidade antígeno-anticorpo, cuja a reação imunoquímica é detectada e o sinal medido por um transdutor. (2) A base de qualquer imunossensor é a especificidade do reconhecimento molecular de antígenos por anticorpos para formar um complexo estável. Este tipo de dispositivo é definido de acordo com o método de detecção, neste caso, serão utilizados métodos eletroquímicos, em específico os potenciométricos. A interação antígeno-anticorpo na superfície de uma membrana sensível provoca alterações da densidade local de carga e, portanto, da diferença de potencial entre a superfície sensora e o eletrólito. Este potencial pode ser detectado por dispositivos sensores de pH (3) devido a alta sensibilidade dos mesmos. Destaca-se a utilização de transistores de efeito de campo (FETs), em especial o FET metal óxido semiconductor (MOSFET) cuja porta pode ser substituída por um eletrodo de referência em contato com um eletrólito, chamado FET de porta estendida e separada (SEGFET) e também amplificadores de instrumentação (AI). É possível medir concentrações bem reduzidas, da ordem de  $\mu\text{g.mL}^{-1}$  e até  $\text{ng.mL}^{-1}$ , o que é interessante do ponto de vista diagnóstico, pois é possível detectar as concentrações do antígeno de interesse dentro do limite inferior em que podem ser encontradas no organismo infectado, promovendo um diagnóstico precoce. Resultados preliminares mostram que a utilização de materiais não nernstianos (por exemplo o ouro) como eletrodos possibilitam a detecção da interação antígeno-anticorpo. No entanto, a possibilidade de detecção está intrinsecamente relacionada ao comprimento de Debye, parâmetro que representa a distância da superfície sensora da qual é possível sentir alterações de carga. Deste modo, é interessante a otimização do eletrodo de modo a utilizar ao máximo todo comprimento de Debye disponível. Inicialmente, o projeto visa estudar a clivagem do anticorpo e a utilização de seus próprios grupos tiol para imobilização no eletrodo de ouro, apresentando grande potencial para melhora do sinal.

**Palavras-chave:** Imunossensores. Doenças negligenciadas. FET.

### Referências:

- 1 ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DE SAÚDE. Disponível em: <<http://www.who.int/en/>>. Acesso em: 09 ago. 2013.
- 2 LUPPA, P. B.; SOKOLL, L. J.; CHAN, D. W. Immunosensors-principles and applications to clinical chemistry. **Clinica Chimica Acta**, v. 314, n. 1-2, p. 1 - 26, 2001.
- 3 MARQUETTE, C. A.; BLUM, L. J. State of the art and recent advances in immunoanalytical systems. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 21, n.8, p. 1424-1433, 2006.

## PG72

### TiO<sub>2</sub> assisted rhodamine B photodegradation via multiphotonic excitation

FIGUEREDO, T. R.<sup>1</sup>; VIVAS, M. G.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

tarcisiorfig@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

1. Introduction: Rhodamine B (RhB) has a relatively high nonlinear absorption, allowing interesting applications in optics and photonics. It has the setback of being highly toxic and hard to dispose. One already known way to degrade RhB is the addition of Titanium Dioxide ( $TiO_2$ ) molecules and further irradiation with visible light. (1) In this work we studied the photodegradation of RhB assisted by  $TiO_2$  and induced by 30-fs laser pulses at 800 nm. To determine the nonlinear process responsible for the photodegradation, Z-scan measurements were carried out in RhB and  $TiO_2$  solutions. Such study can help understanding fundamental aspects related to the interaction between  $TiO_2$  and RhB in the photocatalytic process. 2. Experimental: We used the open aperture Z-Scan to evaluate the two photon absorption cross-section of RhB and  $TiO_2$ . An optical parametric amplifier pumped by a Ti:Sapphire laser (775 nm, 1KHz) was used as the excitation source (600 nm to 1000 nm). RhB was dissolved in methanol (6 mg/mL), while a suspension of  $TiO_2$  was prepared in water with a concentration of 0.1 mg/mL. To study the photodegradation of RhB assisted by  $TiO_2$ , we used a Ti:Sapphire laser operating at 800 nm and (30-fs pulses). In this experiment the sample was irradiated for 30 minutes and subsequently the absorption spectrum was measured. Such experiments were carried out for excitation pulse energies varying from 30  $\mu$ J to 300  $\mu$ J (spot of 8 mm). 3. Results and discussions: The degradation rate increases by approximately 38 % when  $TiO_2$  is present in the sample, indicating that even by nonresonant fs-excitation, the photocatalytic takes place. To understand these results we conducted Z-Scan measurements, in which we determined that the two-photon absorption (2PA) cross-section for RhB is at least 100 higher than for  $TiO_2$  at 800 nm. Therefore, we believe that RhB is excited by 2PA, subsequently transferring the excited electron to the  $TiO_2$  conduction band, which in turn produces free radicals  $OH\bullet$  and  $O_2^-$  that degrade RhB. (2) Further measurements are being performed to strengthen our proposition.

**Keywords:** Multiphotonic degradation. Rhodamine B. Titanium dioxide.

#### Referências:

- 1 LIBANORI, R. et al. Improved photocatalytic activity of anisotropic rutile/anatase  $TiO_2$  nanoparticles synthesized by the ti-peroxo complex method. **Journal of Nanoscience and Nanotechnology**, v. 12, n. 6, p. 4678-4684, June 2012.
- 2 ZHAO, J. et al. Photoassisted degradation of dye pollutants in aqueous  $TiO_2$  dispersions under irradiation by visible light. **Journal of Molecular Catalysis A: chemical**, v. 120, n. 1, p. 173-178, June 1997.

## PG73

### Estudos de modelagem molecular de candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas

FIORAVANTI, C. M.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

cesar.fioravanti@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, a doença de Chagas afeta aproximadamente 15 milhões de indivíduos (1), principalmente na América Latina, onde é considerada um grave problema de saúde pública com graves consequências em termos de morbidade e mortalidade humana. O arsenal terapêutico contra a doença é bastante limitado e insuficiente em todos os aspectos clínicos. No presente trabalho de dissertação de mestrado foram selecionados dois conjuntos de dados baseados em derivados sintéticos com pronunciadas propriedades anti-T. cruzi. Estes amplos conjuntos, contendo dados sobre a estrutura química e a atividade biológica, serão empregados para o desenvolvimento de estudos das relações quantitativas entre a estrutura e atividade (QSAR) empregando metodologias modernas 2D e 3D. Durante o desenvolvimento do QSAR os conjuntos, de aproximadamente 100 moléculas, serão divididos em grupos de 50, de forma a se manter uma distribuição uniforme dos valores de atividade biológica. Diversas combinações de conjunto treinamento serão avaliadas para que o melhor modelo seja obtido. Espera-se que a integração dos modelos desenvolvidos com os estudos de modelagem molecular seja de grande importância para o entendimento das razões moleculares da atividade biológica nestas séries de compostos e para o desenvolvimento de candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas.

**Palavras-chave:** Chagas. QSAR. HQSAR.

#### Referências:

1 MARQUES, J.; MENDOZA, I; NOYA, B; ACQUATELLA, H; PALACIOS, I; MARQUES-MEJIAS, M. ECG manifestations of the biggest outbreak of Chagas disease due to oral Infection in Latin-America. **Arquivos Brasileiros de Cardiologia**, July 2013. doi: 10.5935/abc.20130144 .

## PG74

### Nonlinear index of refraction of borate glass doped with transition metals

FONSECA, R. D.<sup>1</sup>; ALMEIDA, J. M.<sup>1</sup>; DE BONI, L.<sup>1</sup>; HERNANDES, A. C.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

rubenfonseca@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The large interest in nonlinear optical materials has been motivated by their potential use in the fabrication of all-optical photonic devices. Among several interesting candidates for such application, glasses have received special attention because of the facility to tailor their properties by compositional changes. It is well known that nonlinear optical properties are enhanced when the excitation energy approaches an electronic transition. In this study, we have doped a transparent glass ( $E_g = 3.92$  eV) with transition metals, in order to introduce electronic transitions in visible spectrum and to evaluate their influence on the nonlinear index of refraction ( $n_2$ ). (1) A new glassy matrix, containing mainly boron, zinc and lead oxides, was doped with 0.1% mol of CdCl, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MnO and CoO, which resulted in broad absorption bands in different regions of the spectrum. A Ti:sapphire chirped pulse amplified system (150-fs, 775 nm and 1 kHz) and the z-scan technique were employed to measure  $n_2$  from 550 up to 1500 nm. For the undoped sample, we found an average value of  $n_2 = 4.5 \times 10^{-20}$  m<sup>2</sup>/W at visible and infrared regions, being about twice larger than the value for fused silica. Similar values were obtained for the doped samples, which are practically constant in the range of 550-1550 nm, indicating that the dominant transitions contributing to the nonlinear process are located in the UV region of the spectrum and, therefore, associated to the glass matrix.

**Keywords:** Nonlinear index of refraction . Transition metals. Z-scan technique .

#### Referências:

1 MANZANI, D.; ALMEIDA, J. M. P.; NAPOLI, M.; DE BONI, L.; NALIN, M.; AFONSO, C. R. M.; RIBEIRO, S. J. L.; MENDONÇA, C. R. Nonlinear optical properties of tungsten lead pyrophosphate glasses containing metallic copper nanoparticles. **Plasmonics**, July 2013. doi:10.1007/s11468-013-9585-z.

## PG75

### A first-principles investigation of the adsorption mechanisms of TM (Rh, Pd, Ir, Pt) on Cu(111) and Au(111) surfaces

FREIRE, R. L. H.<sup>1</sup>; KIEJNA, A.<sup>2</sup>; SILVA, J. L. F.<sup>3</sup>

freire.rafaelheleno@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Institute of Experimental Physics - University of Wrocław / Instituto de Química de São Carlos - USP

<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Transition-metal (TM) systems such as Ru, Rh, Pd, and Pt are widely used as catalytic devices, which play an essential role for a wide range of technological applications.(1-3) Thus, there is a great interest to improve the reactivity properties of those systems(1-3), in particular, for electrochemistry applications such as the hydrogen production from ethanol. Several experimental and theoretical studies have suggested that the formation of surface alloys or the deposition of strained TM monolayers on TM supports can be considered as a route for the designing of new catalytic devices(2-3). However, the designing of new catalysts devices is a complex task, which requires a complete understanding of macroscopic and microscopic parameters, in particular, an atomistic understanding of the stability mechanisms of TM systems supported on the Cu(111) and Au(111) supports. In this work, we will report a first-principles investigation of the adsorption mechanism of TM (Rh, Pd, Ir, Pt) on Cu(111) and Au(111) surfaces employing density functional theory (DFT) within the generalized gradient approximation (GGA) as implemented in the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP). In this work, we considered TM coverages ranging from  $\Theta_{\text{TM}} = \frac{1}{9}$  to  $\Theta_{\text{TM}} = 1.0$  monolayer (ML) employing a  $(3 \times 3)$  surface unit cell. For TM/Au(111) and Rh/Cu(111) systems, we found an energetic preference for the mixture of the TM adatoms on the topmost surface layer at low coverages, i.e., the initial formation of surface alloy, while at high coverages (1 ML) there is a clear preference for sub-surface-like sites. That is, the support atoms, Cu or Au, are exposed to the vacuum region instead of the TM adatom monolayers. Thus, the catalytic active atoms are not exposed to the surface, and hence, it affects the reactivity of the system. However, a different behavior was found for Pd, Ir, and Pt on Cu(111) at high coverage  $\Theta_{\text{TM}} \sim \frac{3}{9} \sim \text{ML}$ ,  $\Theta_{\text{TM}} = 1.0 \sim \text{ML}$  and  $\Theta_{\text{TM}} \sim \frac{5}{9} \sim \text{ML}$ , respectively). For example, for a nearly full monolayer coverage, we found that the Pd, Ir, and Pt adatoms are exposed directly to the vacuum region, which can be explained by the large compressive strain induced by the Cu(111) support. To obtain an atomistic understanding of molecular adsorption trends on those systems, we employed the Nørskov model(1-3), which correlates the magnitude of the adsorption energy with the position of the *d*-band center regards to the Fermi level. We found that the *d*-band center for overlayer shifting to closer Fermi level regards to support clean surface for both Cu(111) and Au(111). So, for  $\Theta_{\text{TM}} = \frac{1}{9} \sim \text{monolayer}$  the shift is around 0.6 eV decreasing towards to *d*-band center for support clean surface, where  $\Theta_{\text{TM}} = 1.0 \text{ ML}$ . The adsorption energy increase slightly when coverage increasing for all configurations, it being to TM/Cu(111) higher than TM/Au(111) surfaces. The lowest adsorption energies occurs for Pd/[Cu,Au](111) varying between 3.0 and 3.5 eV/atom. This

work can contribute for both advances in understanding the phenomena in science surfaces, as well as the development of new catalysts.

**Keywords:** Density functional theory. Transition metal surfaces. Adsorption on surfaces.

#### **Referências:**

- 1 NØRSKOV, J. K.; ABILD-PEDERSEN, F.; STUDT, F.; BLIGAARD, T. . Density functional theory in surface chemistry and catalysis. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States**, v. 108, n.3, p. 937-943, 2011.
- 2 SANTANA, J. A.; RÖSCH, N. Metal-supported metal clusters: a density functional study of Pt<sub>3</sub> and Pd<sub>3</sub>. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 116, n. 8, p. 10057-10063, 2013.
- 3 KITCHIN, J. R.; NØRSKOV, J. K.; BARTEAU, M. A.; CHEN, J. G. Modification of the surface electronic and chemical properties of Pt(111) by subsurface 3d transition metals. **Journal of Chemical Physics**, v. 120, n.21, p. 10240-10246, 2004.



## PG76

### Interação da luz com uma nuvem ultrafria de átomos de rubídio

FRITSCH, A. R.<sup>1</sup>; CUEVAS, F. J. P.<sup>1</sup>; MUNIZ, S. R.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

amilson.fis@gmail.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A Condensação de Bose-Einstein (BEC) é um tópico de pesquisa de interesse em muitas áreas da física porque contém muita riqueza conceitual, e pode ser utilizada para comprovar conceitos fundamentais da termodinâmica, mecânica quântica, mecânica estatística e matéria condensada. A condensação de Bose-Einstein ocorre abaixo de uma temperatura específica para cada espécie de átomo, conhecida como temperatura crítica. Quando os átomos atingem esta temperatura todos ocupam o estado de mais baixa energia e passam a ser descritos pela mesma função de onda, com uma mesma fase, sendo que não é mais possível tratar cada átomo de forma individual. (1) Experimentalmente precisamos obter uma amostra de átomos bastante densa e muito fria, sendo necessário a utilização de várias técnicas de resfriamento. Com a amostra condensada usualmente utilizamos a técnica de imagem por absorção para obtermos as informações da amostra, como seu tamanho, número de átomos, fração condensada e temperatura. (2) Na fase atual do experimento pretendemos estudar a coerência de fase da nuvem por meio da luz emitida pelos átomos condensados, sendo que para esse estudo utilizaremos outra técnica de imagem, conhecida como imagem de fluorescência, que utiliza a luz emitida pelos átomos quando decaem ao estado fundamental. No entanto, os átomos condensados estão todos no estado fundamental e não emitem luz espontaneamente, sendo assim, precisamos incidir luz sobre a amostra e depois captar a luz proveniente da emissão dos átomos. Esta luz será separada e depois recombinada, onde esperamos observar um padrão de interferência gerado pelo fato da amostra ser coerente.

**Palavras-chave:** Condensação de Bose-Einstein. Átomos frios. Armadilha magneto-óptica .

#### Referências:

- 1 LEGGETT, A. J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: some fundamental concepts. **Review of Modern Physics**, v. 73, n. 2, p. 307-356, 2001.
- 2 HARUTINIAN, J. A. S. **Study of excitations in a Bose-Einstein condensate**. 2011. 189 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

## PG77

### The mechanisms behind the enhancement of the near-infrared light emission due to Er+Yb ions in an optical microcavity

GALLO, I. B.<sup>1</sup>; ZANATTA, A. R.<sup>1</sup>; BRAUD, A.<sup>2</sup>; MONCORGÉ, R.<sup>2</sup>

ivanbragagallo@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>MIL-UniCaen-France

Physical structures able to control the properties of light have been the subject of many research projects. Typical examples of such structures are optical microcavities (OMCs) that have the capacity of filtering and amplifying specific radiation (1-2). This characteristic makes OMCs very attractive in the fabrication of light sources, like lasers and LEDs, which are widely used in modern telecommunication systems. Within this context two optical microcavities, consisting of alternating amorphous silicon (a-Si) and amorphous silicon nitride (a-SiN) multilayers, with different active layers, were investigated: one containing an Er-doped a-SiN (OMC-Er), and the other an ErYb-doped a-SiN (OMC-ErYb). The OMCs were deposited on silica substrates by the radio frequency sputtering technique which also provided the Er- and ErYb-doped layers. Motivated by the importance of optical-fiber-based data transmission for long distances, for example, the OMCs were designed to present a transmission window in the near-infrared region. Reflection and transmission measurements proved the existence of a reflection (transmission) window at 1510 nm for the OMC-Er and at 1530 nm for the OMC-ErYb. Room-temperature photoluminescence measurements of both OMCs revealed an emission at 1530 nm ten times more intense than the emission of the plain doped layers, i.e. out of the cavities. Besides that, the emission of OMC-ErYb was ten times more intense than the one measured in the OMC-Er. The experimental results clearly indicate the suitability of using a combination of Er<sup>3+</sup> and Yb<sup>3+</sup> ions to induce a greater enhancement in the emission of a microcavity. Along with the details concerning the production and characterization of the OMCs, the present contribution will also discuss the excitation-recombination mechanisms involving the Er<sup>3+</sup> and Yb<sup>3+</sup> ions.

**Keywords:** Microcavities. Rare-earth. Photoluminescence.

#### Referências:

1 GRÜN, M.; MISKA, P.; DEVAUX, X.; RINNERT, H.; VERGNAT, M. Optical properties of a silicon-nanocrystal-based-microcavity prepared by evaporation. **Optical Materials**, v. 33, n. 8, p.1248-1251, 2011.

2 LI, Y.; ALMEIDA, R. M. Photoluminescence from a Tb-doped photonic crystal microcavity for white light generation. **Journal of Physics D: applied physics**, v. 43, n. 45, p. 1-7, 2010.

## PG78

### Entanglement entropy in one-dimensional spin chain system under quenched disorder

GELETINA, J. C. A.<sup>1</sup>; ALCARAZ, F. C.<sup>1</sup>; HOYOS, J. A.<sup>1</sup>

jc\_getelina@hotmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The study of entanglement entropy is widely used in order to classify universality classes and also determine low-energy properties of different statistical mechanics and condensed matter systems. There are many important results on systems that has conformal invariance, for example the one-dimensional spin-1/2 anisotropic Heisenberg chain. (1) In this study, however, we intent to investigate systems with no conformal invariance and thus, introduce quenched randomness in this chain. Firstly, we show that this system displays a family of universality classes tunned by the disorder strength of the random variables. Then, surprisingly, by numerically studying the Rényi entanglement entropy, we show that the conformal field theory predictions fit perfectly our data. This opens the possibility that the properties of entanglement, predicted by conformal-invariant systems, are much more broad and may be more fundamental. Finally, it poses a theoretical challenge of searching for a new effective theory which also includes this sort of disordered system.

**Keywords:** Entanglement entropy. Disordered systems. Spin chains.

#### Referências:

1 LIEB, E.; SCHULTZ, T.; MATTIS, D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. **Annals of Physics**, v. 16, n. 3, p. 407-466, 1961.

## PG79

# Structural studies of three beta-galactosidases from *Xanthomonas campestris*

GODOY, A. S. de<sup>1</sup>; CAMILLO, C. M.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

andregodoy@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Glycosyl hydrolases are an important group of enzyme with the potential of catalyze the glycosil bond between two carbohydrates. Today we know about 120 families of glycosyl hydrolases, dispersed in all phyla from life. In particular, beta-galactosidases are an important class of enzymes that can be found in families 1, 2, 35 and 42. Those are responsible for the hydrolysis of beta one-four bond between a galactosyl and another carbohydrate. In addition, those enzymes are also responsible for the synthesis of galacto-oligosaccharides, an important class of prebiotics, commonly found in yogurts.(1) Furthermore, the natural substrate for those enzymes is usually lactose, which makes them a viable target for biotechnology applications in food industry.(2) Here we want to explore in a structural level, both synthetic and catalytic capacities of three beta-galactosidases from *Xanthomonas campestris*, expressed by the genes Xcc\_1754, Xcc\_2404 and Xcc\_2895. For that, we cloned all three genes in pET\_Trx expression vector, and overexpressed all enzymes in *E. coli*. Then, all enzymes pure enzymes were crystallized, and x-ray data was collected in National Synchrotron Light Source (New York, USA). From that, structural models were produced for all three enzymes, with multimeric conformation of asymmetric unit in the three cases. Molecular models provide us a good insight from active site, which can help us to understand the mechanisms of those enzymes. We are now conducting functional studies to add with our structural information, what should increase our level of knowledge from this class of enzymes.

**Palavras-chave:** Beta-galactosidase. Crystallography. Enzyme.

### Referências:

1 HUBER, R. E.; KURZ, G.; WALLENFELS, K. A quantitation of the factors which affect the hydrolase and transgalactosylase activities of beta-galactosidase (*E. coli*) on lactose. **Biochemistry** v.15, n.9, p. 1994-2001, 1976.

2 LOMER, M. C.; PARKES, G. C.; SANDERSON, J. D. Review article: lactose intolerance in clinical practice—myths and realities. **Alimentary Pharmacology & Therapeutics**, v.27, n.2, p.93-103, 2008.

## PG80

### Development of a system for imaging Rydberg atoms in a CO<sub>2</sub> dipole trap and in an optical lattice

GONÇALVES, L. F.<sup>1</sup>; KONDO, J. D. M.<sup>1</sup>; MARCASSA, L. G.<sup>1</sup>

luisfelipe@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

There has been an increasing interest in cold Rydberg atoms over the last several years. The primary reason for this attention is that interactions between Rydberg atoms are strong and lead to many interesting and useful phenomena, which require high atomic density samples. In this work, we present the development of a new system of imaging Rydberg atoms, this system consist of a conjunct of electrodes(1) that ionize the Rydberg atoms and send the ions to a TOF spectrometers witch have an MCP at the end. This MCP has a phosphor screen that allows us imaging the positions of each ion that strikes at MCP. We have already built an experimental setup to investigate cold Rydberg atom collision in a CO<sub>2</sub> optical dipole trap. This new imaging system will allow us to investigate the dynamics of the excitations of Rydberg states and specifically the dynamics involving the mechanisms of population transfer between Rydberg atoms(2-3). During the presentation we shall present preliminary results involving the calculations of the new TOF system and some preliminary results on Rydberg cold collisions in a CO<sub>2</sub> Dipole trap.

**Palavras-chave:** Optical trap. Rydberg atoms. Long range interactions.

#### Referências:

1 KUHNLE, E. D. **Rydberg excitation of a Bose-Einstein condensate**. 2006. 92 p. Ph. D. Thesis (Physics) - Physikalisches Institut, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2006.

2 CABRAL, J. S. et al. Manipulation of quantum state transfer in cold Rydberg atom collisions. **New Journal of Physics**, v. 12, p. 093023-1-093023-15, Sept. 2010. doi: 10.1088/1367-2630/12/9/093023.

3 CABRAL, J. S. et. al. Effects of electric fields on ultracold Rydberg atom interactions. **Journal of Physics B**, v. 44, n. 18, p.184007-1184007-12, 2011.

## PG81

### **Rastreamento de linfonodo sentinela através de técnicas de fluorescência óptica com o uso de indocianina verde.**

GOVONE, A. B.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

govone@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As imagens por fluorescência vêm sendo amplamente utilizadas em exames de diagnóstico médico e trazem muitos benefícios, entre eles o alto contraste da imagem e a alta sensibilidade - na qual mesmo pequenas concentrações são visíveis(1). Essas inovações trazem consigo a possibilidade de otimização do mapeamento do linfonodo sentinela.(1) O linfonodo sentinela (LS) norteia o prognóstico do comprometimento linfonodal e consequentemente a conduta em exérese tumoral, incrementando a detecção de metástases. Ele permite o estadiamento linfático de tumores sólidos, guiando assim à terapêutica. O LS pode ser identificado durante a cirurgia por meio de contrastes vitais ou radiofármacos injetados no tumor e detectados a seguir pelo detector de radiação (probe)(3). Prossegue-se então com análise citopatológica que propicia a identificação de metástases. Como exemplo, cita-se o câncer de mama, no qual caso a técnica do LS esteja disponível, pode-se identificar os pacientes que necessitam se submeter a linfadenectomia axilar, que consiste na retirada do LS e cadeia axilar(2). A Indocianina Verde é um contraste amplamente utilizado já há muitos anos em exames de imagem, tais como a Angiografia, e também permite a localização de linfonodos sentinela em cirurgias oncológica(1). Tal aplicação permite a detecção e avaliação do linfonodo sentinela, guiando um possível esvaziamento ganglionar da cadeia linfonodal da qual ele se refere, caso este se faça necessário. Já na área de Oftalmologia, com a indocianina verde possibilitou-se o estudo mais detalhado do acometimento coróide em patologias vasculares e inflamatórias de gestantes diagnosticadas com pré-eclâmpsia e outras doenças hipertensivas. A Indocianina Verde possui espectro de absorção na faixa de 800nm, com pico de 780nm e fluorescência na faixa de 850nm, com pico em 845nm. A pesquisa a iniciar-se neste semestre está na fase de revisão bibliográfica e seu principal objetivo é o desenvolvimento de um equipamento de imagem de fluorescência de campo amplo para a localização do linfonodo sentinela. O equipamento desenvolvido conterá fonte de alimentação, câmera infravermelha com filtro de comprimento de onda, monitor e LED de 780nm de alta potência capaz de irradiar uma grande área a determinar-se posteriormente. Faz-se necessário a determinação da marca e modelo do LED e da câmera infravermelha a serem utilizados, contendo também filtro para fótons na região de 850nm. As características da fonte a ser desenvolvida dependerão da tensão e corrente do LED que será utilizado. A avaliação inicial do dispositivo será realizada em um modelo animal utilizando ratos Wistar e a injeção na cadeia sublingual da indocianina verde. Esse trabalho será desenvolvido em colaboração com o Dr. André Carvalho do Hospital do Câncer de Barretos.

**Palavras-chave:** Câncer. Linfonodo sentinela. Indocianina verde.

**Referências:**

- 1 ALANDER, J. T. et. al. A review of indocyanine green fluorescent imaging in surgery. **International Journal of Biomedical Imaging**, v. 2012, p. 940585-1-940585-26, 2012. doi: 10.1155/2012/940585.
- 2 BRASIL. Ministério da Saúde. **Controle do câncer de mama**: documento de consenso. Rio de Janeiro: Instituto Nacional de Câncer (INCA), 2004.
- 3 HUTTEMAN, M. et. al. Randomized, double-blind comparison of indocyanine green with or without albumin premixing for near-infrared fluorescence imaging of sentinel lymph nodes in breast cancer patients. **Breast Cancer Research Treatment**, v. 127, n. 1, p. 163-170, May 2011.

## PG82

### Desenvolvimento de um aparato de instrumentação para estudos de eletrocomunicação em peixes elétricos de campo fraco

GUARIENTO, R. T.<sup>1</sup>; ALMEIDA, L. O. B.<sup>1</sup>; BARROS, K. L. P.<sup>1</sup>; GONÇALVES, M. R.<sup>1</sup>; PINTO, R. D.<sup>1</sup>

rafael.tuma.guariento@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Estudar o comportamento de peixes-elétricos de campo fraco é uma oportunidade única em Neurociência (1), pois estes animais produzem padrões elétricos que podem ser detectados de maneira não invasiva e fazem parte de ao menos duas atividades sensoriais complexas realizadas simultaneamente: - A construção de uma "imagem elétrica" dos arredores; - A comunicação social com coespecíficos. Os padrões produzidos são extremamente sensíveis à diversas variáveis ambientais, como ruídos mecânicos, elétricos e luminosos do meio, as condições físico-químicas da água, a presença de poluentes, contaminantes, dentre outras. Entretanto, esses animais conseguem com sucesso utilizar estes sentidos elétricos para localizar presas e navegar em ambiente turvos ou na ausência de luz, bem como para se comunicar eletricamente e resolver disputas territoriais e de acasalamento em um ambiente natural ruidoso e multivariável. Na primeira etapa deste projeto desenvolvemos um aparato experimental para a realização de experimentos com peixes elétricos da espécie *Gymnotus carapo*, consistindo de um aquário com eletrodos em seus vértices e arestas, blindado com uma gaiola de Faraday, bem como a instrumentação eletrônica necessária para a aquisição dos instantes de disparo destes animais.

**Palavras-chave:** Instrumentação eletrônica. Peixes elétricos de campo fraco. Eletrocomunicação.

#### Referências:

1 BULLOCK, T. H. The future of research on electroreception and electrocommunication. **Journal of Experimental Biology**, v. 202, p. 1455-1458, 1999.



## PG83

### Estudos estruturais e funcionais da proteína CrNIP7 de *Chlamydomonas reinhardtii*

GUTIERREZ, R. F.<sup>1</sup>; CRUSCA, J. S. A.<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P. U.<sup>1</sup>

raissa.gutierrez@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A biogênese do ribossomo é um processo complexo, altamente ordenado e regulado, no qual o transcrito primário deve ser processado por endo e exonucleases para gerar os RNAs ribossomais maduros. NIP7 é uma proteína conservada envolvida na biogênese dos ribossomos, atuando na formação da subunidade ribossomal 60S em levedura, e 40S, em humanos (1,3). *Chlamydomonas reinhardtii* é uma alga unicelular, um organismo evolutivamente ancestral a leveduras e humanos (2), portanto a principal proposta deste projeto é determinar o papel da proteína homóloga a NIP7, codificada pelo gene *CrNip7*, em *C. reinhardtii*. Para isso, o gene *CrNip7* foi isolado para a expressão e purificação da proteína recombinante CrNIP7 para futuros estudos estruturais, como análise de estrutura secundária por dicroísmo circular e ensaios de cristalização, além de estudos funcionais como ensaios de complementação de função em levedura, que estão em andamento. O gene *CrNip7* foi amplificado por PCR a partir do cDNA total de *C. reinhardtii* e subclonado no vetor de expressão pETSUMO, o qual foi usado para transformar células competentes de *E. coli* Rosetta(DE3). A expressão da proteína recombinante SUMO-CrNIP7 foi realizada em meio LB, contendo canamicina e cloranfenicol, com indução de 0,4 mM de IPTG a 20°C por 16h. Testes de solubilidade mostraram que a proteína recombinante SUMO-CrNIP7 (34 kDa) foi altamente expressa na fração solúvel. A purificação foi realizada por cromatografia de afinidade em coluna de Ni-NTA (Qiagen), sendo a clivagem da proteína de fusão com SUMO protease realizada por 16h, com a fusão ainda imobilizada na coluna. A posterior eluição da CrNip7 foi feita em tampão (50 mM Tris, 0,5 M NaCl pH 8) e esta proteína será avaliada com relação a sua estabilidade e estrutura. Para o ensaio de complementação de função em levedura, três cepas diferentes de *Saccharomyces cerevisiae* serão utilizadas: a cepa DG130, que possui o gene *nip7* mutado (*nip7-1*), o que a tornou termossensível; as cepas DG440 e DG442 possuem *nip7* nocauteado, sendo que a DG440 possui um plasmídeo com *NIP7* selvagem sob seu próprio promotor e a DG442 possui um plasmídeo com o gene *nip7-1* sob o promotor GAL. Como *nip7* é um gene essencial e de cópia única no genoma de levedura (3), o ensaio de complementação de função em levedura com *CrNip7* de alga será importante para direcionar os estudos funcionais, ou seja, determinar se a proteína CrNIP7 será mais semelhante com a sua homóloga de levedura ou de humanos.

**Palavras-chave:** *Chlamydomonas reinhardtii*. Biogênese de ribossomo. Expressão heteróloga.

#### Referências:

1 MORELLO, L. G.; HESLING, C.; COLTRI, P. P.; CASTILHO, B. A.; RIMOKH, R.; ZANCHIN, N. I. T. The NIP7 protein is required for accurate pre-rRNA processing in human cells. **Nucleic Acids Research**, v. 39, n. 2, p. 648-665, 2011.

2 MERCHANT, S. S. et al. . The *Chlamydomonas* genome reveals the evolution of key animal and plant function. **Science**, v. 318, n. 5848, p. 245-250, 2007.

3 ZANCHIN, N. I. T.; ROBERTS, P.; DE SILVA, A.; SHERMAN, F.; GOLDFARB, D. S. *Saccharomyces cerevisiae* Nip7p is required for efficient 60S ribosome subunit biogenesis. **Molecular and Cellular Biology**, v. 17, n. 9, p. 5001-5015, 1997.

## PG84

### Influence of two transposable elements in the genome architecture of *Schistosoma mansoni*

JACINTO, D. S.<sup>1</sup>; DE MARCO, R.<sup>1</sup>

dsjdani@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Transposable elements are genetic elements capable of transpose to different locations at a host genome. At their discovery, it was considered that such elements had no useful cellular functions, leading to their classification as parasitic genes. Currently, in addition to the deleterious character, it is recognized that they contribute to the evolution of genomes and, in some cases, may perform some cellular functions. Using bioinformatics resources, we have conducted studies to verify the influence of two families of non-LTR retrotransposons (Perere-3 and SR2) in the *Schistosoma mansoni* genome. Preliminary studies indicate that after the divergence between *S. japonicum* and *S. mansoni*, these elements had a great expansion in their copy number in *S. mansoni*, without parallel expansion in *S. japonicum*. (1) The analysis of the intron regions, containing insertions from either of these two families of transposons, in *S. mansoni* showed that there was approximately 30% of increase in the intron size and GC content when compared to orthologous introns from *S. japonicum*. Insertions were differentially represented along the gene structures with accumulation, in introns, located at the terminal regions of the genes. P3 insertions also tended to orientate themselves in the opposite direction of gene transcription. The insertions of transposon regions enriched in CpG motifs were observed in lower frequency than expected, suggesting that these regions might interfere in the gene functions. Using publicly available transcript data from *S. mansoni*, we detected 94 possible cases of exonization of transposon insertion, producing changes of the protein product. These results suggest that P3 and SR2 insertions may promote relevant functional and structural changes in the *S. mansoni* genes and may have significantly contributed to the differentiation between *S. mansoni* and *S. japonicum*.

**Keywords:** Schistosoma. Transposon. Bioinformatics.

#### Referências:

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

## PG85

### Laser sintering reduces dielectric loss in $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ ceramics.

JESUS, L. M.<sup>1</sup>; SILVA, R. S.<sup>2</sup>; M'PEKO, J. C.<sup>1</sup>

lilianmfisica@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Universidade Federal de Sergipe - UFS

$\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$  (CCTO) has a lot of appeal because of its potential application to microelectronics devices. Such appeal is due to its very high dielectric constant ( $\epsilon'$ ) at room temperature ( $\epsilon' \sim 12,000$ ), which is stable from 100 to 600 K. (1) This material is usually prepared by a conventional mixed oxide technique which generates ceramics with microcrystalline grains and high dielectric loss ( $\tan \delta$ ). The lowest values of  $\tan \delta$  presented in the Literature are around 0.10, still too high when compared to  $\text{BaTiO}_3$  ( $\tan \delta = 0.002$ ), measured under identical conditions. This is the main technological problem for materializing CCTO application. (2) Here, we describe a CCTO synthesis by a modified polymeric precursor method and its sintering, generated employing a  $\text{CO}_2$  laser as the main heating source. The electric properties of CCTO ceramics were investigated to verify the effects of this sintering process on ceramic properties. The laser sintered ceramics displayed a high relative density ( $95 \pm 1\%$ ), with homogeneous microstructure. They also demonstrated a single crystalline phase and dielectric constant values in the range of  $\sim 1100$  to 2100 (with dielectric loss of  $\sim 0.05$ ) when measured at 1 kHz at room temperature. Consequently, our investigation suggests that laser sintering can be an important tool for the optimization of the dielectric properties of CCTO ceramics.

**Keywords:**  $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ . Polymeric precursor method. Giant dielectric constant.

#### Referências:

1 SUBRAMANIAN, M. A.; LI, D.; DUAN, N.; REISNER, B. A.; SLEIGHT, A. W. . High dielectric constant in  $\text{ACu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$  and  $\text{ACu}_3\text{Ti}_3\text{FeO}_{12}$  phases. **Journal of Solid State Chemistry**, v. 151, p. 323-325, 2000.doi: 10.1006/jssc.2000.8703 .

2 KOBAYASHI, W.; TERASAKI, I.  $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$  / $\text{CaTiO}_3$  composite dielectrics: Ba/Pb-free dielectric with high dielectric constants. **Applied Physic Letters**, v. 87, n.3, p. 032902-1-032902-3, 2005.

## PG86

# Abordagem de autômatos celulares caóticos híbridos na criptografia

JUSTO, M. J. M.<sup>1</sup>; BRUNO, O. M.<sup>1</sup>

mj.machicao@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Os autômatos celulares (ACs) são sistemas dinâmicos discretos que podem apresentar comportamentos caóticos a partir de regras simples. Os ACs caóticos vêm sendo aplicados amplamente na Criptografia (1) pois estes possuem características que podem garantir uma encriptação adequada. Porém, a grande necessidade por algoritmos criptográficos mais seguros vem crescendo em razão da necessidade da transmissão massiva de informação sendo necessária a incursão de novas abordagens para atender estes desafios. Uma das etapas deste trabalho de doutorado visa explorar a abordagem dos ACs caóticos híbridos proposto em (2), baseado na intersecção dos ACs e as redes complexas. Assim, serão estudadas novas formas de aproveitar as propriedades caóticas deste modelo para criar sistemas criptográficos que satisfaçam aos critérios de avaliação dos algoritmos criptográficos como são segurança, velocidade, aleatoriedade, entre outros. Em pesquisas anteriores, obtiveram-se resultados promissórios, e espera-se que os resultados desta proposta complementem diversas demandas para uma melhor segurança quando comparados com a literatura.

**Palavras-chave:** Autômato celular caótico. Redes complexas. Criptografia.

### Referências:

- 1 MACHICAO, J.; MARCO, A. G.; BRUNO, O. M. Chaotic encryption method based on life-like cellular automata. **Expert Systems with Applications**, v. 39, n. 16, p. 12626-12635, Nov. 2012.
- 2 MACHICAO, J. **Autômatos celulares caóticos aplicados na criptografia e criptoanálise**. 2013. 116 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

## PG87

### Studying Rydberg interactions in a quasi unidimensional system

KONDO, J. D. M.<sup>1</sup>; GONÇALVES, L. F.<sup>1</sup>; MARCASSA, L. G.<sup>1</sup>

massayuki.kondo@hotmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A great number of experiments using ultra-cold Rydberg atoms has been done in the last decades, due to their long range interactions and sensitivity of electrical fields, they are a important tool for quantum simulations. Dipole blockade can be observed in high density samples and used for prepare entangled systems, leading to scalability in quantum computation. Slow light, entanglement and dressed Rydberg state (Polaritons) can be observed using electromagnetic induced transparency EIT. Our group has studied population transfer in molecular resonances between Rydberg states (1) and effects of electrical field in such processes. (2) To deeply understand the role of Rydberg interactions in decoherence processes, we are loading Rubidium atoms in a quasi-unidimensional dipole trap, in this configuration we can observe anisotropy due to electrical field in dipole-dipole Rydberg pairwise interactions. For this we are building a system of 9 electrodes for application of static electric field and detection and a new source of cold atoms ( 2D MOT).

**Keywords:** Rydberg atoms. Dipole trap. Cold atoms.

#### Referências:

1 CABRAL, J. S.; KONDO, J. M.; GONÇALVES, L. F.; MARCASSA, L. G.; BOOTH, D.; TALLANT, J.; SHAFFER, J. P. Manipulation of quantum state transfer in cold Rydberg atom collisions. **New Journal of Physics**, v. 12, p. 093023-1-093023-15, Sept. 2010. doi: 10.1088/1367-2630/12/9/093023.

2 CABRAL, J. S.; KONDO, J. M.; GONÇALVES, L. F.; NASCIMENTO, V. A. ; MARCASSA, L. G.; BOOTH, D. ; TALLANT, J.; SCHWETTMANN, A.; OVERSTREET, K. R.; SEDLACEK, J.; SHAFFER, J. P. Effects of electric fields on ultracold Rydberg atom interactions. **Journal of Physics B: atomic molecular and optical physics**, v. 44, n. 18, p. 184007-1-184007-12, Sept. 2011.

## PG88

### Montagem experimental e estudos de gases quânticos heteronucleares (NaK)

KRUGER, A. L.<sup>1</sup>; PEÑAFIEL, E. E. P.<sup>1</sup>; VIVANCO, F. A. J.<sup>1</sup>; THOMPSON, K. J.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; FARIAS, K. M.<sup>1</sup>; MAREGA JUNIOR, E.<sup>1</sup>

annelk1@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Os gases quânticos a baixas temperaturas se apresentam interessantes propostas para o estudo de novos fenômenos a nível quântico, como a produção de vórtices e a turbulência quântica em Condensados de Bose-Einstein. Vários estudos a este respeito foram realizados no nosso laboratório (1) e numa sequência natural, estamos iniciando a construção de um novo experimento que permite a produção de uma combinação de dois condensados de Bose-Einstein de diferentes espécies. Serão produzidos dois condensados de átomos: sódio (Na) e potássio (K). Para isso, foi implementado em um primeiro estágio a armadilha magneto óptica (MOT) de sódio em configuração 2D (2) e esta sendo implementado um MOT de potássio também em configuração 2D (3), as quais serão posteriormente transferidas na câmara principal, onde será realizada a condensação. Com esta mistura de dois superfluidos, pretendemos investigar efeitos de transferência de excitações quânticas como as excitações coletivas e vórtices. Efeitos de modulação de comprimento de espalhamento e excitações serão investigados no potássio e verificados efeitos de sua termalização com a segunda espécie. Numa segunda parte, pretendemos gerar um regime turbulento em uma das espécies e transferir esta turbulência quântica para a segunda espécie. Neste caso, uma armadilha óptica altamente confinante poderá ser sobreposta a armadilha magnética, produzindo confinamento para ambas espécies sem problemas restritivos de efeito de gravidade.

**Palavras-chave:** Armadilha magneto óptica. Condensados de Bose-Einstein. Gases quânticos.

#### Referências:

- 1 HENN, E.; SEMAN, J.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K.; BAGNATO, V. S. Generation of vortices and observation of quantum turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 158, n. 3-4, p. 435-442, 2010.
- 2 LAMPORESI, G; DONADELLO, S.; SERAFINI, S.; FERRARI, G. Compact high-flux source of cold sodium atoms. **Review of Scientific Instruments**, v. 84, n. 6, p. 063102-1-063102-7, 2013.
- 3 CATANI, J.; MAIOLI, P.; DE SARLO, L.; MINARDI, F.; INGUSCIO, M. Intense slow beams of bosonic potassium isotopes. **Physical Review A**, v. 73, n. 3, p. 033415-1-033415-9, 2006.

## PG89

### Photodynamic inactivation of microorganisms related to pulmonary diseases: an in vitro study.

LEITE, I. S.<sup>1</sup>; GERALDE, M. C.<sup>1</sup>; SALINA, A. C. G.<sup>2</sup>; MEDEIROS, A. I.<sup>2</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; INADA, N. M.<sup>1</sup>

ilaiali.leite@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Araraquara - UNESP

Lower respiratory infections are among the leading causes of mortality worldwide, being responsible for 1.5 million deaths every year. (1) One of the problems associated with these diseases, e.g. pneumonia, is the growing microbial resistance to antibiotics, which reduces the conventional treatment's effectiveness and creates the necessity of developing new approaches. (2) Photodynamic therapy (PDT) is based on oxidation of cellular components by reactive oxygen species (ROS) produced when photosensitizers are activated by light in an oxygen-rich environment, and it has been used to treat a wide variety of diseases. (3) When the therapy's target is a microorganism instead of a tissue, PDT is called "photodynamic inactivation". This study focuses on the interaction of indocyanine green (ICG), a photosensitizer activated by infrared light, with alveolar macrophages (AM). Initial experiments analyzed ICG toxicity without irradiation in AM with different drug concentrations (9.37, 18.75, 37.5, 75, 150 and 300  $\mu$ M, prepared in phosphate buffered saline) and incubation times (10, 20 and 30 minutes). 96-well plates were prepared containing 105 cells in Dulbecco's Modified Eagle's Medium (DMEM) and AM viability was obtained indirectly via the MTT (3-(4,5-dimethylthiazol-2-yl)-2,5-diphenyltetrazolium bromide) method. Results showed that, for 10 and 20 minutes, viability remained around 93% (excepting 9.37 and 150  $\mu$ M for 10 minutes and 300  $\mu$ M for 20 minutes, which resulted in a viability of 99.6, 89.1 and 82.4%, respectively). For 30 minutes, viability values oscillated around 92%. However, 150 and 300  $\mu$ M yielded values of approximately 76.5% and, due to the low rate of viability, further experimental procedures will be conducted excluding the highest concentration of ICG in order to minimize AM damage. Also, further experiments with *Streptococcus pneumoniae* will be conducted to verify the efficiency of the photodynamic inactivation, employing infrared light as well as the ICG concentrations and incubation periods that were utilized in previous tests. The drug interaction with AM's immunological activity will also be tested.

**Keywords:** Photodynamic inactivation. Infrared light. Pulmonary diseases.

#### Referências:

1 OSSEIRAN, N.; HARTL, G. **Almost a quarter of all disease caused by environmental exposure..** Available in: <<http://www.who.int/mediacentre/news/releases/2006/pr32/en/>>. Acesso em: 18 julho 2013.



2 GUIMARÃES, H. P.; TALLO, F. S.; LOPES, A. A. M.; ORLANDO, J. M. C. **Guia de bolso de UTI..** São Paulo: Atheneu, 2010.

3 HUANG, Z. A review of progress in clinical photodynamic therapy. **Technology in Cancer Research and Treatment**, v. 4, n.3, p. 283-293, 2005.

## PG90

# Estudo estrutural de três beta-glicosidases de *Bacillus licheniformis*

LIBERATO, M. V.<sup>1</sup>; CAMILO, C. M.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

mvliberato@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Beta-glicosidases (E.C. 3.2.1.21) são Hidrolases de Glicosídeos (GHs) que clivam ligações beta-glicosídicas das pontas não redutoras de seus substratos. As beta-glicosidases ocorrem em todos os organismos vivos (bactérias, arqueias e eucariotos) e são responsáveis por processos biológicos fundamentais. Em bactérias e fungos, as beta-glicosidases estão envolvidas no metabolismo da celulose e outros carboidratos. (1) Em plantas, as beta-glicosidases estão relacionadas a uma grande variedade de funções desde regulação do desenvolvimento até defesa química contra o ataque de patógenos. (2) Graças a sua atuação as beta-glicosidases vem sendo alvo de estudos funcionais e estruturais por possuir papel importante na degradação de celulose com finalidade de produção de biocombustíveis. (2) De acordo com a classificação do CAZy (Carbohydrate-Active enZymes), as beta-glicosidases são encontradas em cinco famílias, GH1, GH3, GH5, GH9, e GH30, baseando-se em suas sequências de aminoácidos, enquanto outras ainda não foram classificadas. As enzimas das famílias GH1, GH5, e GH30 estão incluídas no Clan A, que consiste em proteínas com enovelamento estrutural barril (beta/alfa)<sup>8</sup>. Em contraste, o sítio ativo das enzimas GH3 é formado por dois domínios, enquanto as enzimas GH9 possuem enovelamento estrutural barril (alfa/alfa)<sup>6</sup>. Apesar da família GH1 ser a mais estudada, o mecanismo pelo qual as enzimas reconhecem e hidrolisam os substratos com diferentes especificidades continua sendo pouco compreendido. (3) No presente trabalho foi resolvida a estrutura cristalográfica de três beta-glicosidases diferentes da bactéria *Bacillus licheniformis*. As três enzimas possuem o mesmo enovelamento, característico da família GH1, e diferem principalmente nos loops que formam o sítio ativo de cada uma. Além das diferenças encontradas na formação dos sítios ativos, o posicionamento incomum de um dos resíduos catalíticos de uma das enzimas motiva novos estudos funcionais dessa enzima.

**Palavras-chave:** Beta-glicosidases . Biocombustível. Cristalografia.

### Referências:

- 1 BHATIA, Y.; MISHRA, S.; BISARIA, V. S. Microbial beta-glucosidases: cloning, properties, and applications. **Critical Reviews in Biotechnology**, v. 22, n. 4, p. 375-407, 2002.
- 2 WILSON, D. B. Cellulases and biofuels. **Current Opinion in Biotechnology**, v. 20, n. 3, p. 295-299, 2009.
- 3 CAIRNS, J. R. K.; ESEN, A. Beta-glucosidases. **Cellular and Molecular Life Sciences**, v. 67, n. 20, p. 3389-3405, 2010.

## PG91

### Structural characterization of *Trypanosoma brucei* spliceosomal protein U5-15K

LIMA, A. L. de<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>; SILVA, M. T. A. da<sup>1</sup>

ana.lima@hotmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

The trypanosomatidae family comprehends a large number of protozoan parasites, including important etymologic agents of human diseases. Among them *Trypanosoma brucei* (responsible for sleep sickness, a widespread disease in African countries), *Trypanosoma cruzi* (Chagas disease s agent, common in Latin America) and *Leishmanis ssp* (responsible for visceral, cutaneous and mucocutaneous leishmaniasis, found in tropical and subtropical regions) stands out. These parasites show highly conserved biochemical processes, such as the particular system of messenger RNA (mRNA) processing called trans-splicing, where the regions of two separated transcripts (instead of a single pre-mRNA) are bounded.(1) All mature messenger is initialized by the same sequence (40 nucleotides approximately) called splice leader (SL) and require the presence of ribonucleoproteins (snRNPs U1, U2, U4/U6 e U5). The SL sequence is transferred by a RNP particle containing a domain similar to mammalian s snRNP domain, including a Sm binding site.(2) U5-15k, U5 specific protein, is essential to mRNA processing as well as to cell viability.(3) This work refers to the optimization of *T. brucei* spliceosomal protein U5-15k expression and purification, as well as to trials tracking crystallization conditions and self-cleavage tests. The expression was realized using the following construction: U5-15k pET SUMO in *Escherichia coli* and the protein purification was based on affinity and size exclusion chromatography. The pure protein was then submitted to crystallization trials of which four had the potential to produce crystals. Among future prospects are the repetition of crystallization conditions, new self-cleavage tests, indicating defining inhibitors and cleavage site localization, and trials tracking crystallization conditions of cleaved U5-15k.

**Keywords:** U5-15K. Trans-splicing. *Trypanosoma brucei*.

#### Referências:

- 1 McCONVILLE, M. J.; MULLIN, K. A.; ILGOUTZ, S. C.; TEASDALE, R. D. Secretory pathway of trypanosomatid parasites. **Microbiology and Molecular Biology Review**,v.66, n.1, p.122-154, March 2002.
- 2 HERMANN, H.; FABRIZIO, P.; RAKER, V. A.; FOULAKI, K.; HORNIG, H.; BRAHMS, H.; LUHRMANN, R. snRNP Sm proteins share two evolutionarily conserved sequence motifs which are involved in Sm protein-protein interactions. **EMBO Journal**, v.1, n.14, p. 2076, May 1995. .
- 3 DA SILVA, M. T. A.; AMBROSIO, D.L. ;TREVELIN, C. C. ;WATANABE,T. F.; LAURE, H. J.; GREENE, L. J.; ROSA, J. C.; VALENTINI, S. R.; CICARELLI, R. M. B. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memorias do Instituto Oswaldo Cruz** v. 10, n. 2, p. 130 138,



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

March 2011.

## PG92

# Finite temperature quantum field theory and the Unruh effect

LIMA, C. A. U.<sup>1</sup>; VANZELLA, D. A. T.<sup>1</sup>

uliana@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

In the context of the Unruh Effect one can show that the Minkowski vacuum, which contains no particles according to inertial observers, is a KMS state for uniformly accelerated observers. In particular the temperature associated with such state is proportional to the observer acceleration. The KMS property raises the question if it is possible that an accelerated observer could witness a phase transition in an interacting field theory as one reaches the temperature of symmetry restoration present in the conventional finite temperature quantum field theoretical calculation. With respect to such phase transition there is a recent controversy, with one party asserting that the KMS property implies the existence of the phase transition while the other supporting that since the order parameter is a Lorentz scalar one should not observe the said transition. In order to shed light on this controversy this work intends to explore the simple case of the scalar field with quartic interaction together with a chiral interaction for fermions, whose mass comes from a Higgs mechanism, so that in this simple weak-inspired effective model one could look at the fermionic modes to determine if the scalar field is in the broken or in the restored symmetry phase. In this sense one expects to contribute to the understanding of the relation between the Unruh effect and finite temperature quantum field theory.

**Keywords:** Unruh effect. Thermal field theory. Symmetry breaking.

### Referências:

1 HILL, C. T. Can the hawking effect thaw a broken symmetry?. **Physics Letters B**, v. 155, n. 5-6, p. 343-346, 1985.

## PG93

### Descoberta e planejamento de novos agroquímicos para a cultura da cana-de-açúcar

LIMA, G. M. A.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

gustavo.alvares.lima@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O desenvolvimento sustentável apresenta como aspecto marcante a utilização do conhecimento científico para gerar inovações tecnológicas que auxiliam na melhoria das condições de vida dos seres humanos. O foco das pesquisas nesse segmento visa à geração de energia limpa a partir de fontes renováveis. Recentemente, o desenvolvimento sustentável foi o tema da 4ª Conferência Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação (4ª CNCTI) que, entre os desafios estabelecidos, elegeu a agricultura e a bioenergia como tópicos centrais para a construção de um novo padrão de desenvolvimento nacional. Os benefícios ambientais provenientes da produção e do uso dos derivados de cana-de-açúcar fomentam o desenvolvimento de métodos e produtos que aumentem, de modo sustentável, a geração de bioenergia. Dentre os diversos fatores limitantes para o aumento da produção de cana-de-açúcar, destaca-se a ocorrência e a severidade de fitopatologias como a escaldadura das folhas. Essa doença é causada pela bactéria *Xanthomonas albilineans*, sendo encontrada distribuída em praticamente todas as regiões do mundo onde a planta é cultivada. A escaldadura das folhas causa diminuição da produtividade, necessidade de reforma precoce dos canaviais e queda de qualidade do caldo extraído que determinam prejuízos econômicos significativos para os agricultores. (1) Atualmente, não há alternativas disponíveis para o controle químico ou biológico dessa fitopatologia. (1) Portanto, existe uma necessidade urgente de desenvolvimento de novas moléculas como defensivos agrícolas que sejam eficazes, seletivas, de baixo custo e impacto ao meio ambiente. O presente projeto de pesquisa visa à identificação e o desenvolvimento de novas moléculas com atividade antibacteriana, através da triagem de compostos de origem natural e sintética, biologia molecular estrutural e do planejamento em química medicinal, empregando uma combinação de métodos e estratégias avançadas, que contemplam os aspectos modernos do estado da arte no planejamento de moléculas bioativas. Os objetivos propostos neste projeto serão alcançados através do estabelecimento de bases apropriadas para o seu desenvolvimento pleno, fazendo uso da forte infraestrutura, competências e organização multidisciplinar de nosso grupo de pesquisa no Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos, CIBFar (CEPID FAPESP); do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Biotecnologia Estrutural e Química Medicinal em Doenças Infecciosas, INBEQMeDI (INCT CNPq FAPESP); e do Centro de Referência Mundial em Química Medicinal para Doença de Chagas da Organização Mundial de Saúde, OMS do Instituto de Física de São Carlos (IFSC) da Universidade de São Paulo (USP). Um aspecto forte desta proposta é o seu caráter multidisciplinar, que levou ao estabelecimento de colaborações efetivas com pesquisadores de excelência científica em suas respectivas áreas de atuação. Outro aspecto marcante desta proposta é a criação de uma nova linha de pesquisa em Química Medicinal com foco na descoberta e planejamento de novos agroquímicos. Essa nova linha amplia o escopo e agrega valor ao conjunto de projetos conduzidos no CIBFar e INBEQMeDI, além disso, oferece a possibilidade de nosso grupo contribuir para o desenvolvimento sustentável do Brasil através de ações efetivas em ciência,

tecnologia e inovação nas áreas estratégicas de agricultura e bioenergia.

**Palavras-chave:** Agroquímicos. Cana-de-açúcar. Química medicinal.

**Referências:**

1 BIRCH, R. G. . Xanthomonas albilineans and the antipathogenesis approach to disease control. **Molecular Plant Pathology**, v. 2, n. 1, p. 1-11, Jan. 2001.

## PG94

### Estudos funcionais e estruturais de enzimas frutossiltransferases das famílias 32 e 68 de hidrolases de glicosídeos

LIMA, M. Z. T.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>; MUNIZ, J. R. C.<sup>1</sup>

marianaztdelima@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Frutossiltransferases caracterizam-se por serem um grupo de enzimas pertencentes às famílias 32 e 68 das hidrolases de glicosídeos responsáveis pela catálise de reações de transglicosilação em sacarose. Em bactérias, apresentam características bastante relevantes quanto a catálise de certos substratos bem como a formação de seus produtos do ponto de vista molecular e dos mecanismos que levam à sua síntese. (1) Tendo como ponto de partida as diferenças nos processos de catálise das mesmas, procurou-se por meio do presente trabalho, realizarem-se as análises preliminares de um dentre os oito alvos pertencentes à essas famílias e que também serão objeto de estudo e caracterização. Esta trata-se de uma enzima da família 32, descrita como uma beta-frutofuranosidase de *Bifidobacterium adolescentis* ATCC 15703. Desta maneira, o gene em questão foi clonado e inserido em vetor e célula de expressão, sendo então expresso e purificado de forma satisfatória, obtendo-se bom rendimento proteico em mg/ mL. Uma triagem inicial realizada por meio do robô de cristalização *Honeybee* (*Genomic Solutions, Ann Arbor, EUA*) utilizando-se método de matriz esparsa com kits comerciais Hampton (*Hampton Research, Aliso Viejo, EUA*) proporcionou a formação de diversas condições promissoras, com algumas nucleações ao longo das mesmas. (2) A otimização destas, poderá levar à formação de cristais bem estruturados que permitirão a difração e resolução da estrutura. Além disso, os ensaios de atividade enzimática a serem realizados promoverão a elucidação dos processos enzimáticos que envolvem as frutossiltransferases. A evidenciação de tais mecanismos é de grande interesse para a indústria alimentícia e sucroalcooleira, a fim de serem identificadas novas técnicas de manuseio e utilização dos recursos disponíveis, bem como no emprego destas enzimas por meio do aprimoramento e otimização de métodos e no controle destes processos. (3)

**Palavras-chave:** Frutossiltransferases. Hidrolases de glicosídeos. Enzimas.

#### Referências:

- 1 VELAZQUEZ-HERNANDEZ, M. L. et al. . Microbial frutosyltransferases and the role of fructans. **Journal of Applied Microbiology**, v. 106, n. 6, p. 1763-1778, 2009.
- 2 ALBERTO, F.; BIGNON, C.; SULZENBACHER, G.; HENRISSAT, B.; CZJZEK, M. The 3-D structure of invertase (beta-fructosidase) from *Thermotoga maritima* reveals a bimodular arrangement and an evolutionary relationship between retaining and inverting glycosidases. **Journal of Biological Chemistry**, v. 279, n. 18, p. 18903-18910, 2004.
- 3 SEIBEL, J.; JORDENING, H. J.; BUCHHOLZ, K. Extending synthetic routes for oligosaccharides by



enzyme, substrate and reaction engineering. **Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology**, v. 120, p. 163-193, 2010. doi: 10.1007/10\_2009\_54.

## PG95

# Caracterização do emaranhamento em estados mistos via informação de Fisher

LIMA, R. B. B.<sup>1</sup>; PIRES, D. P.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>

rafael.bruno.lima@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As conexões entre os sistemas clássicos e quânticos sempre foram objetos de estudos desde a consolidação da teoria quântica. Com o passar dos anos, a teoria quântica foi consolidando-se cada vez mais e gerando novos campos de pesquisas, como a informação e metrologia quânticas. Uma das principais linhas de pesquisa nessas áreas é a caracterização de emaranhamento, o qual torna-se extremamente complicado para estados mistos. Porém, a combinação da informação de Fisher quântica, juntamente com a variância, implica em um critério para a detecção de estados emaranhados. (1) Entretanto, a informação de Fisher pode ser conectada a diversas grandezas, entre elas, o comprimento termodinâmico, que está intrinsicamente conectado com a métrica do sistema. Essa grandeza mostra a distância entre estados em equilíbrio termodinâmico e é de fundamental interesse para a generalização quando consideramos transformações realizadas em um tempo finito. (2) Nosso trabalho consiste em usar a informação de Fisher relacionada com a métrica e, conseqüentemente, com o comprimento termodinâmico, para descrevermos emaranhamentos em misturas estatísticas.

**Palavras-chave:** Informação de Fisher. Comprimento termodinâmico. Emaranhamento.

### Referências:

1 LI, N.; LUO, S. Entanglement detection via quantum Fisher information. **Physical Review A**, v.88, n.1, p.014301, May 2013.

2 CROOKS, G. E. Measuring thermodynamic length. **Physical. Review. Letters**, v.99, p.100602, 2007. doi:10.1103/PhysRevLett.99.100602.

## PG96

### Estudos de modelagem molecular de novos candidatos a moduladores da proteína tubulina para o tratamento do câncer.

MAGALHÃES, L. G.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

lumagm@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Câncer é a denominação para um conjunto de mais de cem doenças caracterizadas pela multiplicação descontrolada e perda da diferenciação celular. De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS) cerca de 13% de todas as mortes do mundo foram causadas por câncer em 2008. Os tratamentos quimioterápicos atuais são tóxicos e estão sujeitos à resistência em alguns casos. (1) Portanto, o planejamento racional de novas moléculas pode ajudar a minimizar esses problemas e se constitui como o objetivo principal de nosso trabalho de mestrado. Um importante alvo molecular na terapia do câncer é proteína tubulina, que é a subunidade constituinte dos microtúbulos. No presente trabalho de dissertação, os programas de modelagem molecular Surflex, Gold e Autodock Vina foram empregados para o trabalho de docagem molecular (2) de uma série de novas substâncias nos diferentes sítios de conhecidos moduladores (e.g., taxol, colchicina e vimblastina) dessa proteína, cujos mecanismos de ação se baseiam na estabilização ou despolimerização dos microtúbulos, levando em todos os casos à morte celular. (3) Os resultados desses estudos de modelagem molecular indicam que esses novos compostos interagem com o sítio da colchicina, estabelecendo diversas interações de hidrogênio e hidrofóbicas favoráveis. Inclusive, alguns grupos comuns à alguns desses compostos e à colchicina parecem interagir de forma semelhante com os mesmos resíduos de aminoácidos do sítio ativo. Isso sugere que estas substâncias podem apresentar atividade moduladora da tubulina, o que será avaliado em ensaios bioquímicos de polimerização e em ensaios celulares em células tumorais.

**Palavras-chave:** Câncer. Tubulina. Modelagem molecular.

#### Referências:

- 1 RANG, H. P. et al. **Rang and Dale's Pharmacology**. 6th ed. Philadelphia: Churchill Livingstone, 2008.
- 2 KITCHEN, D. B. et al. Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. **Nature reviews: drug discovery**, v. 3, p. 935-949, 2004. doi:10.1038/nrd1549.
- 3 FOJO, T. A. **The role of microtubules in cell biology, neurobiology, and oncology**. Totowa: Human Press, 2008. 587 p.

## PG97

### Estudos estruturais da enzima enolase de *P. falciparum*

MALUF, F. V.<sup>1</sup>; SANTOS, E. A.<sup>2</sup>; SILVA, C. R.<sup>2</sup>; OLIVA, G.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

fernandovmaluf@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Biociências - USP

Nos últimos anos, ações efetivas em políticas de saúde pública conseguiram reduzir significativamente o número de novos casos e mortes por malária, no entanto, em 2010 contabilizou-se 200 milhões de casos de malária e 600 mil mortes ao redor do mundo. (1) O problema tem se agravado com o surgimento de cepas de *Plasmodium falciparum* (agente etiológico da forma mais severa de malária) resistentes aos tratamentos disponíveis. (2) Neste cenário, a seleção e validação de novos alvos moleculares torna-se imprescindível. A via glicolítica em protozoários representa um alvo altamente promissor, uma vez que é o único processo para obtenção de energia do parasita. (3) A enolase, nona enzima desta via, é responsável pela catálise do substrato 2-fosfoglicerato (2-PGA) em fosfoenol piruvato (PEP). Devido à função chave na produção energética do parasita, bem como, pelas diferenças estruturais em relação à homóloga humana, esta enzima é considerada um alvo para desenvolvimento de antimaláricos. Assim, este trabalho objetiva o estabelecimento da produção heteróloga, determinação da estrutura tridimensional e caracterização bioquímica e funcional deste alvo molecular. A sequência de DNA codificante para enzima enolase foi obtida por amplificação através de reação de PCR com molde em uma biblioteca de cDNA de *P. falciparum*. O fragmento amplificado foi clonado através da técnica de ligação independente de clonagem (LIC, do inglês, Ligation Independent Cloning) em três diferentes vetores de expressão (pETM11, pETTrx-1a e pETNusA-1a). Ensaios de expressão indicaram que a Pf-enolase foi produzida em maior escala no sistema bacteriano (Rosetta DE3) com a construção no pETTrx-1a. A Pf-enolase foi obtida com elevado teor de pureza (confirmado por análise eletroforética SDS-PAGE) através de técnicas cromatográficas de afinidade e exclusão por tamanho. A proteína concentrada (30 mg/mL) foi submetida aos ensaios cristalização, o qual avaliou mais de 500 condições diferentes de cristalização. Condições promissoras foram identificadas e após etapas de otimização cristais adequados para os estudos de difração de raios X foram obtidos. Um conjunto de dados a alta resolução e (1.6Å) e com parâmetros estatísticos adequados foi coletado em difratômetro Micromax-007 - R-AXIS IV++ (Rigaku). A estrutura tridimensional foi resolvida por substituição molecular utilizando-se como modelo de busca a estrutura da enolase de *T. brucei* (PDB ID, 2PTY). O refinamento, em andamento, está convergindo para valores estatísticos favoráveis (Rfator = 0,17, Rfree= 0,22). A análise estrutural preliminar indicou enovelamento tipo barril beta/alfa, além do sítio de ligação para o íon magnésio. A análise da estrutura 3D determinada permitirá a identificação dos elementos estruturais responsáveis pelo processo de reconhecimento molecular e de seletividade desta enzima, fornecendo informações que, integrado às técnicas de química medicinal, direcionarão o processo de planejamento de candidatos a antimaláricos baseada na estrutura deste alvo.

**Palavras-chave:** Malária. Glicólise. Enolase.

## Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World malaria report**. Disponível em: <[http://www.who.int/malaria/publications/world\\_malaria\\_report\\_2012/report/en/index.html](http://www.who.int/malaria/publications/world_malaria_report_2012/report/en/index.html)>. Acesso em: 25 jan. 2013.
- 2 DONDORP, A. M. et al. Artemisinin resistance in *Plasmodium falciparum* malaria. **New England Journal of Medicine**, v. 361, n. 5, p. 455-467, 2009.
- 3 OLSZEWSKI, K. L.; LLINÁS, M. Central carbon metabolism of *Plasmodium* parasites. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 175, n. 2, p. 95-103, 2011.

## PG98

### Nanomateriais teranósticos aplicados à problemática do câncer e estudos de nanotoxicidade

MARANGONI, V. S.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTI, V.<sup>1</sup>

valeria@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Os crescente avanço da nanomedicina tem levado ao desenvolvimento de nanomateriais multifuncionais que combinam especificidade e funções terapêuticas e de diagnóstico em um único sistema, chamados de teranósticos. (1) Além das propriedades diferenciadas advindas da estruturação na escala nanométrica, nanomateriais possibilitam a incorporação de vários tipos de moléculas na sua superfície, fazendo com que desempenhem múltiplas funções. Apesar dos grandes avanços na área, há ainda muitos desafios relacionados principalmente a baixa estabilidade e ao tempo de circulação reduzido no sangue. Assim, este projeto de doutorado tem como principal objetivo desenvolver materiais nanoestruturados compostos por nanorods metálicos, polímeros e biomoléculas para aplicações no diagnóstico e tratamento de câncer. Inicialmente, nanorods de ouro foram sintetizados usando crescimento mediado por nucleação na presença de  $AgNO_3$  e CTAB. Partículas com diferentes comprimentos de onda de ressonância plasmônica de superfície, entre 700 e 850 nm, foram obtidas por meio da variação dos parâmetros de síntese. A absorção em comprimentos de onda na região do infravermelho próximo é importante devido a baixa absorção de água e hemoglobina nesta região, facilitando a penetração da radiação nos tecidos. (2) O tamanho e morfologia foram caracterizados por Microscopia Eletrônica de Transmissão, revelando partículas com tamanho e forma bem definidos. A estas estruturas serão incorporadas biomoléculas de reconhecimento e antitumorais, permitindo que estas drogas sejam direcionadas especificamente para o tumor e liberadas pelo aquecimento provocado por fototerapia. As interações entre estes compostos serão analisadas por técnicas espectroscópicas e de calorimetria, visando à obtenção de sistemas com elevada estabilidade e propriedades bem definidas que são requeridas para aplicações em medicina. Estes nanoconjugados serão, ainda, avaliados quanto a sua toxicidade in vitro bem como sua especificidade e interação com diferentes tipos de células tumorais e saudáveis.

**Palavras-chave:** Nanomateriais teranósticos. Nanorods de ouro. Nanomedicina.

#### Referências:

- 1 BARDHAN, R.; LAL, S.; JOSHI, A.; HALAS, N. J. Theranostic nanoshells from probe design to imaging and treatment of cancer. **Accounts of Chemical Research**, v. 44, n. 10, p. 936-946, 2011.
- 2 WEISSLEDER, R. A clearer vision for in vivo imaging. **Nature Biotechnology**, v. 19, p. 316-317, 2001.

## PG99

### **Aplicação da imagem por ressonância magnética para identificação de injúrias mecânicas e tecidos deteriorados em sementes**

MARASSI, A. G.<sup>1</sup>; TANNUS, A.<sup>2</sup>; GOMES JUNIOR, F. G.<sup>3</sup>

agide@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>3</sup>Escola Superior de Agronomia "Luiz de Queiroz- USP

As injúrias mecânicas são consideradas um dos principais fatores que afetam a qualidade de sementes e seus efeitos podem ser evidenciados após a ocorrência das injúrias ou durante o armazenamento, com a manifestação de tecidos deteriorados por patógenos (Carvalho e Nakagawa, 2000). Durante o beneficiamento, as sementes passam por diversos maquinários, onde ocorrem quedas, impactos e abrasões os quais causam lesões no tegumento. Entre os fatores que influenciam a ocorrência de injúrias mecânicas destacam-se as características da própria semente, como tamanho, forma, espessura do tegumento, tipo de tecido de reserva e posição do eixo embrionário. A soja, por exemplo, é sensível às injúrias mecânicas, uma vez que as partes vitais do eixo embrionário estão situados sob um tegumento fino, não lhe oferecendo proteção (França Neto e Henning, 1984). As injúrias mecânicas caracterizadas por aberturas no pericarpo ou no tegumento podem se tornar pontos de infecção e fonte de nutrientes para patógenos. Os efeitos dessas injúrias são agravados quando as lesões estão próximas ao eixo embrionário, podendo provocar alterações fisiológicas qualitativas nas sementes pela presença de fungos de armazenamento (Cicero e Silva, 2003). Durante pouco mais de duas décadas, a avaliação da ocorrência de injúrias mecânicas em sementes foi realizada utilizando produtos químicos que, ao entrarem em contato com as superfícies danificadas das sementes, manifestam na formação de colorações específicas dos tecidos ou no intumescimento do tegumento das sementes. Segundo Cicero et al. (1998) e Cicero e Banzatto Junior (2003), esses métodos têm sido considerados inconvenientes, pois além de não permitirem a germinação das sementes após o tratamento não identificam com precisão as injúrias diretamente relacionadas com as anormalidades nas plântulas ou com a morte dos embriões. Assim, a introdução do teste de raios X para a avaliação da ocorrência de injúrias mecânicas representou um avanço da pesquisa, inicialmente em milho, sendo posteriormente utilizado para a avaliação da ocorrência de injúrias mecânicas em outras espécies como a soja (Obando Flor et al., 2004; Pinto et al., 2009), o feijão (Forti et al., 2008; Mondo et al., 2009) e o milho doce (Gomes Junior e Cicero, 2012). Resultados de pesquisa também evidenciaram a eficiência das análises radiográficas na identificação de tecidos deteriorados em milho. Entretanto, com base em avaliações realizadas no Laboratório de Análise de Imagens do Departamento de Produção Vegetal da USP/ESALQ, a identificação só é possível quando as lesões estão em estágios avançados, sem identificar os tecidos danificados no início do processo. Além da dificuldade para a identificação de tecidos deteriorados, citada anteriormente, existe ainda a limitação do teste de raios X não possibilitar a análise da profundidade das injúrias ou dos tecidos deteriorados e se estes estão atingindo efetivamente

regiões vitais da semente. Assim, a aplicação de procedimentos que permitam maior rigor na avaliação da ocorrência de injúrias mecânicas e de tecidos deteriorados em sementes, baseados na análise de imagens em escala tridimensional, como a Imagem por Ressonância Magnética, possivelmente poderão contribuir para a evolução em Tecnologia de Sementes.

**Palavras-chave:** Ressonância magnética. Injúrias mecânicas. Sementes.

#### **Referências:**

- 1 BEWLEY, J.D.; BLACK, M. **Seeds:** physiology of development and germination. 2nd. ed. New York: Plenum Press, 1994. 445p.
- 2 CARVALHO, N.M.; NAKAGAWA, J. **Sementes:** ciência, tecnologia e produção. 4a ed. Jaboticabal: FUNEP, 2000. 588p.
- 3 CICERO, C.M.; SILVA, W.R. Danos mecânicos associados a patógenos e desempenho de sementes de milho. **Bragantia**, v. 62, n. 2, p. 305-314, 2003.



## PG100

# Estudo da possibilidade de detecção de matéria escura com telescópios Cherenkov

MARCOMINI, J.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

je.marcom@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A existência de matéria escura é sustentada por observações de efeitos gravitacionais sobre a matéria visível. Modelos teóricos foram desenvolvidos com o intuito de descrever as observações deste efeitos. Medidas de curvas de rotação e lentes gravitacionais foram utilizadas para calcular a densidade de matéria escura necessária para causar os efeitos gravitacionais medidos. Porém, a natureza das partículas que constituem matéria escura continua desconhecida. Encontramos na literatura muitas propostas especulativas das propriedades destas partículas e experimentos, entre eles o LHC, que vem tentando limitar a região de validade destas propostas. Telescópios Cherenkov como VERITAS, H.E.S.S., Whipple e CTA (futuramente) podem contribuir de forma única nesta busca. Estes telescópios medem a radiação gama com energia entre GeV-TeV vinda do cosmo. A maioria das propostas teóricas tem, como candidata para matéria escura, partículas que podem se aniquilar. A aniquilação da matéria escura produziria como resultado final raios gama com energia entre GeV-TeV que poderiam ser detectados pelos telescópios Cherenkov. A intensidade e distribuição do sinal produzido depende fundamentalmente da massa da partícula de matéria escura, da seção de choque de aniquilação e da distribuição da matéria escura no Universo. A combinação destes fatores traz um carácter único a medida feita por esses telescópios porque ela une informação da interação das partículas com as informações astrofísicas sobre a distribuição da matéria escura em grandes estruturas no Universo. O objetivo deste projeto de mestrado é estudar a potencialidade do Observatório CTA no estudo de matéria escura. O CTA (The Cherenkov Telescope Array) é um projeto que pretende estudar raios gama de alta energia servindo como um observatório aberto para a comunidade científica. O instrumento deverá estar na faixa de energia bem abaixo de 100 GeV até acima de 100 TeV e terá melhoras em relação sensibilidade dos equipamentos de detecção de raio gama atuais. Estudaremos os diferentes casos de distribuição da matéria escura em distintos ambiente e delimitaremos o espaço de fase no qual o CTA poderá contribuir com medidas significantes. (1)

**Palavras-chave:** Matéria escura. CTA. Raio gama.

### Referências:

1 BRINGMANN, T.; WENIGER, C. Gamma ray signals from dark matter: concepts, status and prospects. **Physics of the Dark Universe**, v. 1, n. 1-2, p. 194-217, Nov. 2012.

## PG101

### Enhancement of ZnO exciton band via pulse shaping

MARTINS, R. J.<sup>1</sup>; SIQUEIRA, J. P.<sup>1</sup>; MISOGUTI, L.<sup>1</sup>; VOSS, T.<sup>2</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

rjuliano@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Institute of Solid State Physics - University of Bremen

ZnO has been investigated as an interesting material for the development of optoelectronic devices operating in the blue-to-near-UV spectral region.(1-2) Besides its large bandgap and exciton binding energy, The emission of ZnO at room temperature, excited by single or multi-photon absorption (3), typically presents a narrow exciton emission band at about 400 nm and a photoluminescence band from deep defects (green band) centered around 560 nm. To control the multi-photon excited luminescence of the ZnO crystal, we used an Ti:Sapphire oscillator as the excitation source (790 nm, 25fs and 86 MHz). The laser was focused with a f=5 cm lens into the sample, perpendicularly to its c-surface, and the ZnO emission was collected and directed to a spectrometer. The excitation pulse temporal profile was shaped via spectral phase modulation using a 640-elements liquid crystal SLM. The pulses were characterized using FROG technique. In this experiment, the excitation of the ZnO luminescence with ultrashort laser pulses centered at 790 nm requires multiple photons, allowing its control by spectral phase modulation of the excitation pulse using a pulse shaper. In an attempt to control the ZnO emission, we used a closed loop strategy in a feedback configuration. In such an approach, an experimental outcome (fitness parameter) is optimized, in our case the ratio between the peak intensities of the exciton and the green emission bands. To understand mechanism behind the selective excitation of ZnO exciton emission, we used the FROG technique to measure the pulse resulting from the GA. The temporal profile of the optimal pulse presents oscillatory features with a periodicity of approximately 50 fs. Such evidence was confirmed by a Fourier analysis of the pulse, in which a peak at approximately 20 THz is observed, corresponding to an energy difference of 82 meV. This result suggests that the GA has optimized the excitation pulses for constructive interference of quantum channels with an energy separation of approximately 82 meV. When fs-pulses interact with the sample, the population in the ground state is transferred to the excited state by multi-photon absorption. It is also known, however, that when fs-pulses with duration shorter than the sample vibration periods propagate through a material, Raman active modes can be excited, since the laser pulse spectrum is broad enough to cover the gap from the initial state to the Raman-excited mode. By temporally shaping the ultrashort pulse, it is possible to control the molecular vibration that is excited. The optimal pulse consists of a pulse train with pulses separated by about 50 fs (82 meV). This value is close to the energy of the LO-phonon sidebands in ZnO emission (72 meV), that are known to be very pronounced at room temperature. Hence, we believe that LO-phonon assisted transitions are the most likely processes to be excited in the control experiment. Therefore, by properly modulating the spectral phase of the pulse, we are able to achieve the constructive interference of absorption pathways involving one or more LO-phonons, which in turn enhance the exciton emission.

**Keywords:** Multiphoton processes. Pulse shaping. Semiconductor materials.

**Referências:**

- 1 KLINGSHIRN, C.; HAUSCHILD, R.; PRILLER, H.; ZELLER, J.; DECKER, M. ; H. KALT, H. ZnO rediscovered - Once again!?. **Advances in Spectroscopy for Lasers and Sensing**, v. 231, p. 277-293, 2006. doi:10.1007/1-4020-4789-4\_15.
- 2 LOOK, D. C. Recent advances in ZnO materials and devices. **Materials Science and Engineering B**, v. 80, n. 1, p. 383-387, 2001.
- 3 VIVAS, M. G. ; SHIH, T.; VOSS, T.; MAZUR, E.; MENDONÇA, C. R. Nonlinear spectra of ZnO: reverse saturable, two- and three-photon absorption. **Opt. Express**, v. 18, n. 9, p. 9628-9633, 2010.

## PG102

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

MATIAS, P.<sup>1</sup>; SLAETS, J. F. W.<sup>1</sup>

paulo.matias@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Peixes elétricos de campo elétrico fraco da espécie *Gymnotus carapo* comunicam-se emitindo pulsos de formato aproximadamente fixo, variando apenas o intervalo entre disparos de acordo com a informação a ser transmitida. (1) Esse tipo de codificação simples é bastante similar ao encontrado em diversos sistemas de neurônios conhecidos, o que torna esses animais muito interessantes para o estudo de sistemas de comunicação, propiciando experimentos que envolvem tanto aspectos comportamentais quanto de codificação neural. O desenvolvimento de instrumentação eletrônica e de métodos de processamento de sinais permite a realização de novas variedades de experimento, expandindo os horizontes da pesquisa na área. Foi criado um método para a realização de experimentos *in vivo*, não-invasivos, com dois peixes nadando livremente em um mesmo aquário, utilizando-se duas diferentes técnicas de processamento digital de sinais. A primeira consiste em identificar características individuais presentes no formato dos pulsos de eletrocomunicação de cada peixe por meio de ferramentas como a transformada wavelet complexa de dupla árvore (2) e a máquina de vetores de suporte. (3) A segunda técnica utiliza o comportamento de continuidade da amplitude e da fase dos sinais coletados em um conjunto de eletrodos para identificar um pulso com base no pulso anterior emitido pelo mesmo peixe. Como continuidade deste trabalho, será desenvolvida instrumentação eletrônica para a realização de experimentos com retroalimentação (*feedback*) em tempo real, o que permitirá estudar a existência de mecanismos de JAR (*jamming avoidance response*) (4-5), além dos mecanismos de comunicação social entre indivíduos da espécie. Desta forma, serão realizados experimentos *in vivo* inéditos, com um grau de naturalismo e liberdade de experimentação bastante acima do encontrado atualmente na literatura.

**Palavras-chave:** Neurobiofísica. Processamento de sinais. Aprendizagem de máquina.

#### Referências:

- 1 BENNETT, M. V.; GRUNDFEST, H. Electrophysiology of electric organ in *Gymnotus carapo*. **Journal of General Physiology**, v. 42, n. 5, p. 1067-1104, 1959. doi: 10.1085/jgp.42.5.1067.
- 2 BAYRAM, I.; SELESNICK, I. On the dual-tree complex wavelet packet and m-band transforms. **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 56, n. 6, p. 2298-2310, 2008. doi: 10.1109/TSP.2007.916129.
- 3 CORTES, C.; VAPNIK, V. Support-vector networks. **Machine Learning**, v. 20, n. 3, p. 273-297, 1995. doi: 10.1007/BF00994018.

## PG103

### Modelagem molecular no desenvolvimento de modelos para estudos da permeabilidade em células caco-2

MATOS, K. S.<sup>1</sup>; MODA, T. L.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

karinamatos@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Os fármacos administrados por via oral são preferencialmente desenvolvidos, devido às questões de mercado, conveniência e segurança. Após a administração por via oral, o fármaco deve passar por vários processos, entre eles: ser dissolvido e solubilizado no trato gastrointestinal para que possa ser absorvido no estômago, ou através do intestino. Este último, denominado absorção intestinal humana (do inglês, *Human Intestinal Absorption - HIA*) é um dos mais importantes para fármacos que atuam por essa via. (1) O emprego de modelos *in silico* foi reconhecido na última década como de fundamental importância na pesquisa e desenvolvimento de fármacos (P&D) devido as suas aplicações na avaliação de substâncias bioativas quanto as suas propriedades físico-químicas e farmacocinéticas. (2) Neste trabalho são descritos modelos *in silico* preditivos, através do método de fragmentos moleculares, holograma QSAR (HQSAR), para a avaliação dos parâmetros que definem a permeabilidade de compostos bioativos em células Caco-2. Estes modelos são de grande relevância, pois poderão ser aplicados a ensaios biológicos experimentais de determinação de propriedades farmacocinéticas, para diversos compostos em estudo no LQMC. Os melhores resultados estatísticos como o valor de coeficiente de correlação linear quadrático com validação cruzada para um conjunto treinamento de 119 compostos (3), foram obtidos utilizando a combinação A/C/DA de fragmentos moleculares. O valor de  $r^2$  adequado sugere que valores de permeabilidade em células Caco-2 podem ser preditos por um modelo construído com as variáveis deste conjunto de dados. Foi observada ainda, uma boa concordância entre os valores de permeabilidade preditos e experimentais para a validação interna e externa do modelo. Portanto, a estratégia de modelagem molecular abordando modelos preditivos para mimetização de propriedades que influenciam a administração de fármacos por via oral é uma ferramenta útil no planejamento de compostos bioativos. Estes modelos poderão auxiliar no planejamento de novos candidatos a fármacos em nosso laboratório.

**Palavras-chave:** Células caco-2. HIA. Modelagem HQSAR.

#### Referências:

- 1 MODA, T. L.; ANDRICOPULO, A. D. . Consensus hologram QSAR modeling for the prediction of human intestinal absorption. **Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters**, v. 22, n. 8, p. 2889, 2012.
- 2 MAY, M. Simulations vs. cells in ADME/tox. Disponível em: <<http://www.dddmag.com/products/2011/10/simulations-vs-cells-adme/tox>>. Acesso em: 12 ago. 2013.
- 3 GAULTON, A.; BELLIS, L. J. A.; BENTO, L. J.; CHAMBERS, J.; DAVIES, M.; HERSEY, A.;



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

LIGHT, Y.; MCGLINCHEY, S.; MICHALOVICH, D.; AL-LAZIKANI, B.; OVERINGTON, J. P. ChEMBL a large-scale bioactivity database for drug discovery. **Nucleic Acids Research**, v. 40, p. D1100-D1107, 2011. doi: 10.1093/nar/gkr777.

## PG104

### Structural and functional characterization of FleQ from *Pseudomonas aeruginosa* and *Xanthomonas citri*: a transcriptional factor involved in flagellar gene expression and biofilm formation

MATSUYAMA, B. Y.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

brunomatsuyama@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

To date it is known that biofilm formation is related to several external factors like nutrients and antibiotic presence (1), however in recent years this process has been elucidated at molecular level, and a novel secondary messenger molecule, c-di-GMP has emerged in the spotlight of scientific research. This molecule is only present among bacteria and its intracellular levels regulate cell adhesion and exopolysaccharide synthesis, thus controlling biofilm formation, responsible for a variety of diseases. (2) Only a few molecular targets of c-di-GMP have been identified, among them, FleQ from *Pseudomonas aeruginosa* (PA), a transcriptional factor that is the main responsible for the flagellar gene expression and that acts also as a exopolysaccharide repressor, this last function being mediated by a second protein, FleN, and in the presence of c-di-GMP, instead of being a repressor, FleQ became an activator for biofilm formation (3). Recent studies reported that FleQ from *Xanthomonas* is also involved in the flagellar gene expression, however, as a repressor, suggesting that FleQ has distinct roles in different bacteria. The high identity between FleQ from those organisms suggests that *Xanthomonas* protein could also be a c-di-GMP receptor. FleQ is constituted by an unknown amino-terminal domain, FleQ, followed by an sigma 54 ATPase domain and a DNA binding motif Helix, Turn, Helix. At the present moment, we already resolved the structure of AAA domain from *Pseudomonas aeruginosa* in both the forms, apo and holo with c-di-GMP, and the structures of FleQ and AAA domains from *Xanthomonas axonopodis* pv. *citri*. Structural analyses of the resolved structures from *Pseudomonas* revealed that the binding of a dimer of c-di-GMP promotes a displacement of the N-terminal towards the ATP binding site of the AAA, inhibiting the ATPase activity of FleQ. Calorimetric assays allowed us to confirm some of the key residues for the interaction with the ligand. These results revealed how c-di-GMP may be inhibiting the FleQ capacity to remodelate the sigma 54 RNA polymerase, a process dependent of the ATP hydrolysis, and consequently, diminishing flagellar gene transcription.

**Keywords:** c-di-GMP. FleQ. Flagelo.

#### Referências:

- 1 O' TOOLE, G.; KAPLAN, H.B.; KOLTER, R. Biofilm formation as microbial development. **Annual Review of Microbiology**, v. 54, p. 49-79, 2000. doi: 10.1146/annurev.micro.54.1.49.
- 2 JENAL, U.; MALONE, J. Mechanisms of cyclic-di-GMP signalling in bacteria. **Annual Review of Genetics**, v. 40, p. 385-407, 2006. doi: 10.1146/annurev.genet.40.110405.090423.

3 ARORA, S.K.; RITCHINGS, B.W.; ALMIRA, E.C.; LORY, S.; RAMPHAL, R. A transcriptional activator, fleQ, regulates mucin adhesion and flagellar gene expression in *pseudomonas aeruginosa* in a cascade manner. **Journal of Bacteriology**, v. 179, n. 17, p. 5574-5581, 1997.



## PG105

### O efeito Farol

MAXIMO, C. E.<sup>1</sup>; BACHELARD, R.<sup>1</sup>; COURTEILLE, Ph. W.<sup>1</sup>

dumax1@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Absorção e emissão de fótons por átomos e moléculas são extremamente importantes no estudo dos efeitos mecânicos da luz sobre a matéria. Quando esses dois processos ocorrem simultaneamente em um conjunto de partículas microscópicas, *efeitos coletivos* surgem e devem contribuir de forma efetiva no movimento de um sistema macroscópico, assim como, no espalhamento de luz. Neste cenário, nuvens de átomos frios são particularmente úteis, pois são macroscópicas como um todo, mas microscópicas ao considerar átomos individuais. Além disso, os laboratórios atuais dominam bem a tecnologia relacionada a manipulação de nuvens atômicas. Como observado nas referências (1-3), efeitos coletivos modificam dramaticamente a pressão de radiação em uma nuvem atômica, devido a um laser incidente, por ordens de grandeza. Em nuvens densas, a presença de átomos pontuais pode ser negligenciada e uma descrição por distribuições contínuas se torna uma boa aproximação. No entanto, o volume finito ocupado pela nuvem causa uma inomogeneidade que difrata a luz incidente. Com este trabalho, pretende-se verificar a existência de um novo efeito coletivo: o *Efeito Farol*. Este fenômeno deve resultar do controle do espalhamento de luz através da manipulação de uma nuvem de átomos frios que sofre a ação de um campo magnético. Espera-se utilizar a interação dos átomos com luz modificada localmente, aliada com a emissão sincronizada da nuvem, para alterar a direção de propagação da radiação espalhada.

**Keywords:** Espalhamento de luz. Interação radiação-matéria. Átomos frios.

#### Referências:

- 1 BUX, S. et al. Cooperative scattering by cold atoms. **Journal of Modern Optics**, v. 57, n.19, p.1841-48, 2010.
- 2 BIENAIMÉ, T. et al. Observation of cooperative radiation pressure in presence of disorder. **Physical Review Letters**. v. 104, n.18, p. 183602, 2010.
- 3 BENDER, H. et al. Direct measurement of intermediate-range Casimir-Polder potentials. **Physical Review Letters**, v. 104, n.8, p. 083201, 2010. doi:10.1103/PhysRevLett.104.083201 .

## PG106

### Identification of Fe/MnSODs structural determinants necessary to metal specificity

MENDOZA, E.<sup>1</sup>; STELMASTCHUK, L. B. F.<sup>2</sup>; FERREIRA JÚNIOR, J. R.<sup>2</sup>; GARRATT, R. C.<sup>1</sup>

mery\_mendoza17@hotmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Escola de Artes, Ciências e Humanidades - USP

Superoxide dismutases (SODs) are metalloenzymes that convert the superoxide anion in molecular oxygen (O<sub>2</sub>) and hydrogen peroxide (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>). The metal in the catalytic center of such enzymes is directly related to their catalysis mechanisms and tridimensional structures. (1) Evolutionarily, FeSOD and MnSOD may have evolved from a common ancestor, because both proteins have homologous primary sequences and superposable crystallographic structures. However, at the catalytic level, both proteins diverged sufficiently to prevent interchange of their metallic centers, which would generate non-functional enzymes, indicating that these proteins have high metal specificity. (2) The objective of this research project is to identify structural determinants of Fe/MnSODs necessary to metal specificity. We intend to use statistical coupling analysis (SCA) to select amino acid residues for site-directed mutagenesis in TbFeSODB2. Mutant genes will be constructed and their proteins expressed, purified and crystallized. The tridimensional structure of such mutants will be solved by X-ray crystallography and their enzymatic activities determined, as well as their electron paramagnetic resonance spectra. We hypothesize that SCA is useful to identify amino acid candidates for site-directed mutagenesis to design new SODs with intermediated Fe/Mn specificity, and even metal specificity interconversion, by studying the evolutionary history of these proteins.

**Keywords:** Superoxide dismutases. Metalloenzymes. Metal specificity.

#### Referências:

1 WINTJENS, R.; GILIS, D.; ROOMAN, M. Mn/Fe superoxide dismutase interaction fingerprints and prediction of oligomerization and metal cofactor from sequence. **Proteins**, v. 70, n. 4, p. 1564-1577, 2007.

2 BACHEGA, J. F.; NAVARRO, M. V.; BLEICHER, L.; BORTOLETO-BUGS, R. K.; DIVE, D.; HOFFMANN, P.; VISCOGLIOSI, E.; GARRATT, R. C. Systematic structural studies of iron superoxide dismutases from human parasites and a statistical coupling analysis of metal binding specificity. **Proteins**, v. 77, n. 1, p. 26-37, Oct. 2009.

## PG107

### Engenharia de interações seletivas e preparação de estados de Fock via reservatório atômico

MERCADO, W. R.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H.Y.<sup>1</sup>

we.rosado@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Até o momento, nos envolvemos em três diferentes trabalhos, Primeiramente, apresentamos um protocolo para a engenharia de interações Jaynes-Comings seletivas (1), lineares e não lineares, para as transições de um, dois e três fótons. Transições de ordem superior também são discutidas. Simulações numéricas são apresentadas para validar a eficácia do nosso protocolo. Analisamos também como aplicar essas interações seletivas para a preparação determinista, passo a passo, de estados de número, mesmo na situação não ideal, em que os mecanismos de perdas da cavidade e a emissão espontânea atômica são considerados. Finalmente, apresentamos um esquema, derivado da engenharia das interações seletivas, para retardar o processo de decoerência de estados de Fock preparados na cavidade. Apresentamos também uma estratégia que combina a ação dos mecanismos de amortecimento da cavidade com aqueles da engenharia de um reservatório atômico (2), para conduzir uma distribuição inicialmente térmica em um estado de Fock estacionário. Para isso utilizamos simultaneamente de interações Jaynes-Cummings e anti-Jaynes-Cummings seletivas. Como outro método alternativo para a proteção de estados de Fock, propomos um hamiltoniano de interação que permite selecionar um subespaço de Fock limitado superiormente  $0,1,2,...,N$ . Através destes hamiltonianos podemos então derivar, através da engenharia de reservatórios, uma forma de Lindblad que, combinada à ação dos mecanismos de perda da cavidade, permite-nos a proteção do estado de Fock.

**Palavras-chave:** Interações seletivas. Estado de Fock . Reservatório atômico.

#### Referências:

1 SANTOS, M. F.; SOLANO, E.; MATOS FILHO, R. L. Conditional large Fock state preparation and field state reconstruction in cavity QED. **Physical Review Letters**, v. 87, n. 9, p. 093601-1-093601-4, 2001.

2 PIELAWA, S.; DAVIDOVICH, L.; VITALI, D.; MORIGI, G. . Engineering atomic quantum reservoirs for photons. **Physical Review A**, v. 81, 043802-1-043802-11, 2010. doi:10.1103/PhysRevA.81.043802.

## PG108

### Comparação genotípica e fenotípica de *Enterococcus faecalis* resistentes à vancomicina isolados nos anos de 2009 e 2011 em um hospital de Minas Gerais

MERLO, T. P.<sup>1</sup>; MARCELLO JUNIOR, H. B.<sup>2</sup>; CAMARGO, I. L. B. C.<sup>1</sup>

thais.merlo@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Laboratório Geraldo Lustosa - Belo Horizonte

*Enterococcus* são cocos Gram positivos que ocorrem isolados, aos pares (diplococos) ou em cadeias e pertencem à microbiota intestinal de uma grande variedade de hospedeiros, de mamíferos a insetos. *Enterococcus* foram originalmente considerados organismos de pouca importância clínica, mas têm se revelado importantes patógenos nosocomiais. (1) O fato dos *Enterococcus* possuírem formas de resistência intrínseca e adquirida a vários antibióticos dificulta o tratamento de infecções causadas por eles. *Enterococcus faecalis* é geralmente a espécie predominante entre os enterococos isolados, sendo de 80% a 90% das amostras clínicas. (2) O surgimento de *Enterococcus* resistentes à vancomicina (VRE- do inglês *vancomycin resistant enterococci*) reduziu significativamente as opções de tratamento. (3) O objetivo deste estudo foi identificar e comparar amostras de *E. faecalis* resistentes à vancomicina (VREfs) isolados em pacientes nos anos de 2009 e 2011, durante um programa de vigilância no Hospital Risoleta Tolentino Neves, em Belo Horizonte, MG. A identificação das espécies foi feita por PCR com primers específicos de *E. faecalis*, *E. faecium*, *E. gallinarum* e *E. casseliflavus* e os *E. faecalis* foram selecionados para estudo. Foram realizados testes de prevalência dos genes *elrA*, *cyl*, *esp* e *gelE*, a determinação do genótipo responsável pela resistência e a caracterização dos transposons que contêm o gene de resistência, todos por meio de PCR. Foi também realizada a determinação da concentração inibitória mínima (CIM) de acordo com o CLSI (2013) para vancomicina, linezolida, tigeciclina e daptomicina e testes para resistência a altas concentrações de aminoglicosídeos. Por fim, a tipagem das amostras foi feita através de eletroforese em campo pulsado (PFGE- do inglês *Pulsed Field Gel Eletroforesis*). Foi encontrado que 22,2% dos VRE isolados em 2009 e 61,7% dos isolados em 2011 pertencem à espécie *E. faecalis* e estes foram utilizados no estudo. Houve um aumento na resistência à tigeciclina nos isolados de 2011 com relação aos de 2009, sendo 10 isolados resistentes. Foi encontrado um isolado de 2011 com resistência intermediária à linezolida. Todos os isolados foram sensíveis à daptomicina e altamente resistentes à vancomicina, com CIM maior que 256 µg/mL. Essa alta resistência à vancomicina é condizente com o genótipo *vanA*, encontrado em todas as amostras. O perfil de virulência prevalente nos VREfs em 2009 era *elrA+gelE+*, sendo dos pulsotipos A4 e A5 e ST103. Apenas um isolado de 2009, com pulsotipo A4 apresentou o perfil de virulência *cyl+esp+elrA+gelE+*. Em 2011, o perfil de virulência prevalente foi *cyl+esp+elrA+gelE+*, sendo que os 12 isolados com esse perfil pertenciam aos pulsotipos B e C e ST6, que ocorreram somente em isolados de 2011. Onze amostras de 2011 apresentaram o perfil *elrA+gelE+* e, assim como as

amostras de 2009, foram classificadas no pulsotipo A. Resultados de PFGE mostram a inserção no hospital da linhagem ST6, um clone multirresistente amplamente disseminado em hospitais da Itália, Portugal e Espanha. Concluiu-se que houve mudanças no perfil de *E. faecalis* resistentes à vancomicina no hospital, ao longo dos dois anos, com aumento de resistência e linhagens mais virulentas, sendo estes motivos de preocupação.

**Palavras-chave:** *Enterococcus faecalis*. VRE. Resistência.

#### **Referências:**

1 HOLLENBECK, B. L.; RICE, L. B. Intrinsic and acquired resistance mechanisms in enterococcus. **Virulence**, v. 3, n. 5, p. 421-433, 2012.

2 OH, J. Y. et al. . Phenotypic and genotypic differences of the vancomycin-resistant *Enterococcus faecium* isolates from humans and poultry in Korea. **Journal of Microbiology**, v. 45, n. 5, p. 466-472, 2007.

3 HENRIQUE, P. M. et al. Molecular characterization of enterococci harboring genotype and Molecular characterization of enterococci harboring genotype and in Brazilian hospitals. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 103, n. 3, p. 301-305, 2008.

## PG109

### Quebra espontânea de simetria: estudo teórico e computacional

MIGLORIA, A.<sup>1</sup>; MENDES, T. C. R.<sup>1</sup>

alexandre.migloria@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo das simetrias é de grande importância para o entendimento do Modelo Padrão, e inclui especialmente o entendimento dos casos em que há quebra da simetria, o que é o interesse de estudo deste projeto. Chama-se de quebra espontânea de simetria ao fenômeno que ocorre quando a lagrangiana (ou hamiltoniana) de um sistema apresenta uma simetria que não é respeitada pelo estado físico observado.(2) A quebra espontânea da simetria tem várias implicações como por exemplo o mecanismo de Higgs, que explica o termo de massa dos bósons  $W^+$ ,  $W^-$  e  $Z^0$  da força eletrofraca.(3) Esse fenômeno pode ser observado também em sistemas mais simples, como no chamado Modelo de Ising, introduzido para explicação da presença de magnetização espontânea em materiais ferromagnéticos abaixo da temperatura crítica. Destacaremos o modelo de spins de Ising bidimensional no qual utilizamos o chamado método de Monte Carlo, que permite a geração numérica de configurações típicas para o sistema a uma dada temperatura.(1)

**Palavras-chave:** Simetria. Modelo Ising. Física estatística.

#### Referências:

- 1 GIORDANO, N. J.; NAKANISHI, H. **Computational physics**. 2nd. ed. Upper Saddle River: Pearson/Prentice Hall, 2006.
- 2 GRIFFITHS, D. **Introduction to elementary particles**. 2nd. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2008.
- 3 MAGGIORE, M. **A modern introduction to quantum field theory**. Oxford: Oxford University Press, 2010.

## PG110

### Técnicas de resfriamento e aprisionamento de átomos aplicadas a átomos de estrôncio

MIGUEZ, M. L.<sup>1</sup>; COURTEILLE, P. W.<sup>1</sup>

maria.miguez@usp.br, malumiguez@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho iremos descrever os métodos usados para obtenção de uma amostra ultra-fria de átomos de estrôncio. Os mecanismos usados para preparar a amostra são: um desacelerador Zeeman e duas armadilhas magneto-ópticas (MOT). O primeiro MOT operando na transição  $^1S_0 - ^1P_1$  (azul) e o segundo na transição  $^1S_0 - ^3P_1$  (vermelha). Com relação ao primeiro estágio, se faz necessário o uso de um laser de comprimento de onda de  $497nm$ , que através da transição  $^3P_2 - ^3D_2$  recuperam os átomos que sofrem transição para os chamamos estados escuros. O último estágio é uma armadilha de dipolo para átomos de estrôncio usando apenas um feixe laser com comprimento de onda de  $1064nm$ . O carregamento dessa armadilha é feito transferindo uma amostra atômica já pré-resfriadas. Explicamos de que maneira é feita a análise e aquisição dos resultados apresentados. Ressaltamos ainda a importância dos resultados obtidos para o projeto atual e para projetos futuros do grupo.(1)

**Palavras-chave:** Armadilha de dipolo. Átomos de estrôncio. Átomos ultra-frios.

#### Referências:

- 1 STELLMER, S. **Degenerate quantum gases of strontium**. 2013. 246 p. Ph. D. Thesis (Science) - Faculty of Mathematics, Computer Science and Physics, University of Innsbruck, Innsbruck. 2013.

## PG111

### **Interação de compostos com atividade sobre a enzima cruzaina em monocamadas de Langmuir como modelo de membrana celular**

MONTANHA, E. A.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>

erica.montanha@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A enzima cruzaina é a principal cisteína protease do *Trypanosoma cruzi*, agente etiológico da doença de Chagas, e portanto valioso alvo para novos fármacos contra essa infecção. Neste trabalho está sendo investigada a interação de uma classe de compostos que atuam sobre a cruzaina com modelos de membrana celular, constituídos por filmes de Langmuir, com o objetivo de identificar candidatos a fármacos. As monocamadas de Langmuir são formadas ao se espalhar material anfifílico na interface ar-água (1). Com a compressão por barreiras móveis, pode-se simular diferentes estágios de compactação de uma membrana, cujas propriedades mecânicas e elétricas podem ser inferidas de medidas de pressão e potencial de superfície. Será usado o fosfolípido fosfatidilcolina de dipalmitoíla (DPPC) para formar os filmes de Langmuir, interagindo com compostos que agem sobre a cruzaina. Resultados preliminares indicam que o composto não forma filme de Langmuir sozinho e não interage com o DPPC, quando espalhado sobre a água. Os próximos passos da investigação incluem testes com tampão na subfase e com lipídeos carregados, como o dipalmitoil fosfatidil glicerol (DPPG).

**Palavras-chave:** Filmes de Langmuir. Biomembrana. Doença de Chagas.

#### **Referências:**

1 LANGMUIR, I. The constitution and fundamental properties of solids and liquids. II. liquids. **Journal of the American Chemical Society**, v. 39, n. 9, p. 1848-1906, 1917.



## PG112

### Estudo da difusão de troca entre poros utilizando técnicas 1D e 2D de RMN

MONTRAZI, E. T.<sup>1</sup>; SOUZA, A. A.<sup>2</sup>; D'EURIDYCE, M. N.<sup>3</sup>; SILVA, R. O.<sup>1</sup>; POLLI, R. S.<sup>1</sup>; FORTULAN, C. A.<sup>4</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

elton.montrazi@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Schlumberger–Doll Research

<sup>3</sup>School of Chemical and Physical Sciences - Victoria University of Wellington - New Zealand

<sup>4</sup>Escola de Engenharia de São Carlos - USP

A ressonância magnética nuclear (RMN) é uma poderosa ferramenta para os estudos de meios porosos. (1) Contudo, como os experimentos estão baseados na inversão de decaimentos multiexponenciais, um problema mal posto, e, como os meios porosos naturais apresentam distribuições de tamanho de poros muito variadas e impurezas paramagnéticas, as interpretações dos resultados é sempre um trabalho árduo. Assim, como projeto de mestrado, foi proposto e executado a manufatura de cerâmicas porosas de alumina como um meio poroso padrão. (2) Agora essas cerâmicas estão sendo utilizadas em várias subáreas do grupo como um meio padrão para os experimentos de relaxometria, para os estudos de imagem por RMN e para simulações através das imagens de microtomografias de raios-X obtidas. As cerâmicas foram manufaturadas pelo processo de sinterização na qual se preserva uma porosidade intrínseca e, adicionalmente durante o processo de manufatura, foi introduzido um agente porogenico para induzir poros maiores. Cristais de sacarose foram escolhidos como agente porogenico, os quais foram selecionados utilizando peneiras. Durante o processo de sinterização os cristais são degradados e volatizados, criando uma cerâmica com poros induzidos interconectados pelos poros intrínsecos. Como uma primeira parte do doutorado, está sendo estudada a técnica *T<sub>2</sub> × T<sub>2</sub> Exchange* que é extremamente útil para a caracterização de troca entre poros e da conectividade entre eles, fatores importante para análise da extração do óleo e gás. (3) Para iniciar foi escolhida uma cerâmica que apresenta poros intrínsecos de aproximadamente 0,5  $\mu\text{m}$ , estimado por porosimetria de intrusão de mercúrio, e poros induzidos entre 100 e 300  $\mu\text{m}$ , estimado por microtomografia de raios-X, ambas com porosidade de aproximadamente 15%. Pelo fato dessa amostra apresentar apenas duas distribuições de tamanhos de poros bem distintas, foi possível observar os picos de correlação no mapa 2D correspondente a migração dos poros intrínsecos para os poros induzidos e vice e versa. A técnica original 2D de *T<sub>2</sub> × T<sub>2</sub> Exchange* é custosa em termo de tempo de experimento, da ordem de 3 horas para um único tempo de mistura. Para isso foi proposto pelo grupo a técnica 1D que leva apenas da ordem de minutos para um tempo de mistura. Essa técnica já foi implementada para os estudos das rochas. Contudo, a vantagem de utilizar a amostra padrão é compreender melhor o experimento 1D o qual possui solução analítica das equações de troca para o sistema de dois sítios. A expectativa futura é manufaturar cerâmicas introduzindo impurezas paramagnéticas de uma forma controlada e observar

como essas afetam os resultados de RMN.

**Palavras-chave:** RMN. Meios porosos. T2xT2.

#### **Referências:**

- 1 DUNN, K. J.; BERGMAN, D. J. **Nuclear magnetic resonance:** petrophysical and logging applications. New York: Pergamon, 2002. 293p. ISBN 0-08-043880-6.
- 2 MONTRAZI, E. T. **Estudos de cerâmicas porosas de alumina através da medida de tempos de relaxação via ressonância magnética nuclear.** 2012. 164p. Dissertação (Mestre em Ciências) Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.
- 3 FLEURY, M.; SOUALEM, J. Quantitative analysis of diffusional pore coupling from T2-store-T2 NMR experiments. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 336, n. 1, p. 250-259, 2009.

## PG113

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

MORAES, T. B.<sup>1</sup>; COLNAGO, LUIZ A.<sup>1</sup>

tiago.moraes@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A precessão livre no estado estacionário (SSFP) consiste na aplicação de uma sequência de pulsos de mesma fase, amplitude e duração, espaçados por um tempo  $T_p$  muito menor que os tempos de relaxação  $T_1$  e  $T_2$ . Essa sequência é extensivamente utilizada em baixa resolução para aquisições rápidas de sinais de RMN obtendo excelente razão sinal/ruído. (1) Em alta resolução, a SSFP introduz sérias anomalias de fase e amplitude, e por isso ainda é pouco explorada na comunidade científica. Essas anomalias são provenientes da presença do eco no sinal FID adquirido e vários métodos têm sido propostos para contornar esse problema. As duas principais técnicas foram a Scrambled Steady State (2) e a Quadriga Fourier Transform (3), apesar de apresentarem bons resultados, não foram capazes de suprimir completamente as anomalias dos espectros. O objetivo deste projeto é avaliar detalhadamente as sequências de pulsos SSFP com alternância e incremento de fase e propor uma nova metodologia para obtenção de espectros de RMN no estado estacionário sem anomalias de fase e amplitude de  $^{13}\text{C}$  e outros isótopos. Nesses dois anos de projeto implementamos diversas sequências de pulso SSFP com alternância de fase, e verificou-se que através das sequências SSFP, SSFPx-x, SSFPxx-x-x e SSFPdx pode-se efetivamente suprimir a componente eco no sinal no domínio do tempo e conseqüentemente obter a eliminação do seu efeito de supressão de sinais no espectro no domínio da frequência. A SSFP com alternância de fase se apresenta com grande capacidade de eliminação da componente eco nos sinais no estado estacionário. Entretanto, a efetiva eliminação e geração de um perfil de excitação plano só foi obtida com a introdução de múltiplos blocos de sequências SSFPdx com incremento de fase. Os sinais de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  foram adquiridos no espectrômetro Bruker 14,1 T e no Varian Inova 9,4 T.

**Palavras-chave:** RMN. SSFP. CWFP.

#### Referências:

- 1 VENÂNCIO, T.; ENGELSBERG, M; AZEREDO, R. V.; COLNAGO, L. A. Fast and simultaneous measurement of longitudinal and transverse NMR relaxation times in a single continuous wave free precession experiment. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 173, n. 1, p. 34-39, Mar. 2005.
- 2 RUDAKOV, T. N.; BELYAKOV, A. V. Modifications of the steady-state free-precession sequence for the detection of pure nuclear quadrupole resonance. **Journal of Physics D**, v. 31, n. 10, p. 1251-1256, May 1998.
- 3 BANGERTER, N. K.; HARGREAVES, B. A.; VASANAWALA, S. S.; PAULY, J. M.; GOLD, G. E.;



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

NISHIMURA, D. G. Analysis of multiple-acquisition SSFP. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 51, n. 5, p. 1038-1047, May 2004.

## PG114

### Human septins SEPT5-SEPT7-SEPT8 interact in a hetero-complex

MORAIS, S. T. B.<sup>1</sup>; MACEDO, J. N. A.<sup>1</sup>; CRUSCA, E.<sup>1</sup>; LOPES, J. L. S.<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P. U.<sup>1</sup>

sinarateixeira@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Septins are proteins belonging to the GTPases family that were initially recognized as essential for the achievement of the cell cycle in *Saccharomyces cerevisiae*. These proteins are involved in important cellular processes, such as cytokinesis and membrane trafficking, and some of them have been found to be involved in neurological disorders, as the Alzheimers disease. The human genome encodes 13 septins which are divided into 4 subgroups based on their sequence similarity. Structurally, all septins have a high conserved domain GTP-binding flanked by variable N-terminus, which may include a short polybasic motif which, in turn, has been shown to bind with the plasmatic membrane; and a C-terminus region of variable length. Since proteins from different subgroups interact among themselves to form filaments, many different combinations could be assembled, but only a few have been actually described so far. (1) Based on our previous results of septin interactions from Yeast Two-Hybrid experiments, we have started biochemical and biophysical studies on putative heterocomplexes, particularly human septins 5, 7 and 8. In order to verify if those septins interact, a co-expression system was designed. SEPT7 was fused with His-tag and co-expressed with SEPT5 and SEPT8 in *E. coli*. All the septins were recovered after co-purification by nickel affinity chromatography, thus validating the interaction. The presence of human septins 5, 7 and 8 in the complex was confirmed by mass spectroscopy. Current efforts are aiming to check if this complex is able to form filaments.

**Keywords:** Assemble. Hetero-complex. Septin.

#### Referências:

1 SIRAJUDDIN, M. **Structural studies on mammalian septins:** new insights into filament formation. 2007. 113 p. Ph. D. Thesis (Chemistry) - Dortmund University, Dortmund, 2007.

## PG115

### Avaliação do transporte intracelular de isoformas da pulchellina utilizando microscopia confocal

MOREIRA, H. H. T.<sup>1</sup>; CRUSCA, J. S. A.<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P. U.<sup>1</sup>

helinetm@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A pulchellina é classificada como uma proteína inativadora de ribossomos tipo 2 (RIP tipo 2), sendo uma glicoproteína heterodimérica com duas cadeias. A cadeia A é enzimaticamente ativa e é capaz de remover uma adenina da porção 28S do rRNA, a cadeia B é uma lectina que se liga a resíduos de D-Galactose terminal presentes nos receptores de membrana(1). A pulchellina apresenta-se sob diferentes isoformas que diferem entre si em níveis de citotoxicidade. Das suas 4 isoformas já caracterizadas (PI, PII, PIII, PIV), PII é a mais tóxica e a PIV a menos tóxica, mas ambas possuem atividade catalítica equivalente. A interação da pulchellina com os glicoreceptores de membrana e seu consequente processo de endocitose é crucial para que cadeia A tóxica entre na célula e torne-se disponível para atuar no seu sítio ribossomal(2). Visando compreender como essas isoformas interagem com membrana, conduzimos estudos de microscopia confocal para permitir a visualização do processo de endocitose e transporte intracelular dessas toxinas em células de mamíferos(3). Inicialmente, a PII foi conjugada com Alexa Fluor 4884<sup>®</sup> (Molecular Probes) (PII\*), e a PIV foi conjugada com Alexa Fluor 594<sup>®</sup> (Molecular Probes) (PIV\*). Células das linhagens MV3 (melanoma humano) e HeLa foram tratadas com uma solução de meio DMEN contendo 2000 ng/mL das proteínas marcadas PII\* e PIV\*, juntas e separadamente. As células foram fixadas durante 20 min. com solução de formaldeído 3,7% em uma lâmina, e submetidas à microscopia confocal de fluorescência. Em paralelo, foi acompanhada a entrada das toxinas em células não fixadas. Pôde-se observar que a PII\* e PIV\* se distribuíram pelo citoplasma em estruturas vesiculares. PII\* preferencialmente se distribuiu na região central e perinuclear da célula formando estruturas endossomais vesiculares, já a PIV\* se distribuiu em vesículas menores na região periférica das células. Desse modo, os experimentos indicaram que a endocitose e o transporte intracelular de PII e PIV tem uma dinâmica diferente, indicando que as utilizam diferentes rotas de tráfego, o que pode estar correlacionado com as diferentes citotoxicidades que PII e PIV apresentam.

**Palavras-chave:** Pulchellina. Transporte intracelular. RIP tipo II.

#### Referências:

1 ARAUJO, A.P.U.; CASTILHO, P.V.; GOTO, L.S. Ribosome-inactivating proteins from *Abrus pulchellus*. **Toxic Plant Proteins**, v. 18, p. 133-147, 2010. doi:10.1007/978-3-642-12176-0\_7.

2 CASTILHO, P.V.; GOTO, L.S.; ROBERTS, L.; ARAUJO, A.P.U. Isolation and characterization of four type 2 ribosome inactivating pulchellin isoforms from *Abrus pulchellus* seeds. **FEBS Journal**, v. 275, n. 5, p. 948-959, 2008.



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

3 MOISENOVISH, M.; AGAPOV, I.; MARX, U.; HAHN, J. B.; TONEVITSKY, A. Intracellular transport of plant toxins ricin and viscumin from different plasma membrane sites. **Drug Research**, v. 53, n. 6, p. 470-475, 2003.

## PG116

### Radiação em uma nuvem de estrôncio

MORIYA, P. H.<sup>1</sup>; COURTEILLE, Ph. W.<sup>1</sup>

paulohisao@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Muitos fenômenos da interação entre luz e matéria ainda não foram totalmente compreendidos. Como exemplos, pode-se citar a questão do valor correto para a quantidade de momento que um fóton troca com um meio dielétrico, conhecido como dilema de Minkowski e Abraham, sendo necessária uma compreensão microscópica da distribuição do recuo de um fóton sobre os átomos. Outro exemplo se dá quando os fótons ficam presos dentro de nuvens atômicas devido ao compartilhamento entre todos os átomos, a sub-radiância, ou quando a desordem não permite que eles escapem, a localização de Anderson. Pela teoria em desenvolvimento em nosso grupo (1-3) sobre o espalhamento cooperativo de luz por nuvens atômicas, pode-se notar uma significativa alteração na pressão radiativa da luz emitida principalmente por nuvens atômicas e que esta pode ser mapeada com a teoria de Mie para a emissão de luz. (2) Foi possível também preencher a lacuna entre o espalhamento por amostras de partículas localizadas e distribuições de densidade contínuas, tais como meios dielétricos. Neste sentido, pode-se investigar halos de recuo produzidos em nuvens de condensados de Bose-Einstein por espalhamento de fótons individuais, em particular os que parecem conter uma medida direta do espalhamento da luz dentro da nuvem (3). Para aprofundar o estudo dos efeitos coletivos e confirmar a teoria desenvolvida para uma nuvem de gás, estamos aprimorando a armadilha magneto-óptica para confinar, resfriar e ultra resfriar átomos de estrôncio, escolhido por ser uma das mais interessantes espécies atômicas para gases quânticos devido à existência de transições de resfriamento e de relógio estreitas. Tais características levam a uma versatilidade de aplicações tais como relógios atômicos ultras precisos, computação quântica, gravímetros, moléculas ultra resfriadas e em testes de variação de constantes fundamentais no tempo.

**Palavras-chave:** Estrôncio. Armadilhas magneto-ópticas. Efeitos coletivos.

#### Referências:

- 1 COURTEILLE, PH. W.; BUX, S.; LUCIONI, E.; LAUBER, K.; BIENAIMÉ, T.; KAISER, R.; PIOVELLA, N. Modification of radiation pressure due to cooperative scattering of light. **European Physical Journal D**, v. 58, n. 1, p. 69-73, 2010. doi: 10.1140/epjd/e2010- 00095-6.
- 2 BACHELARD, R.; COURTEILLE, PH. W.; KAISER, R.; PIOVELLA, N. Resonances in mie scattering by an inhomogeneous atomic cloud. **Europhysics Letters**, v. 97, p.14004, 2012. doi:10.1209/0295-5075/97/14004.
- 3 BACHELARD, R.; PIOVELLA, N.; COURTEILLE, PH. W. Cooperative scattering and adiation pressure force in dense atomic clouds. **Physical Review A**, v. 84, n.1, p. 013821, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.013821.



## PG117

### A basic mechanism for contrast normalization

MOSQUEIRO, T. S.<sup>1</sup>; MAIA, L. P.<sup>1</sup>

thiago.mosqueiro@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Biologically sensory networks rely on complex mechanisms of information processing to characterize the external environment incredibly well, a process known as neural coding. In general, these systems are required to reliably code information in a large range of stimuli intensities, demanding a better explanation than simply assuming they are ruled by tuning curves with large dynamic range processes. (1) For instance, the human vision is able to encode twelve different orders of magnitude of light intensity. Indeed, with growing interest people have been investigating propitious adapting mechanisms in which average measures of the background rise a baseline over which the actual stimulus being encoded is contrasted to. This effect is now called contrast normalization (2), and its detailed origin is not fully understood, motivating several experiments (mainly in visual system). (3) We show that a balanced network of integrate-and-fire neurons, connected by chemical synapses with plasticity, naturally exhibit contrast normalization. In fact, without plasticity, these networks can cope with only two orders of magnitude of stimulus intensity, while the learning-like dynamics allows them to adapt themselves whatever be the necessity to properly codify a given stimulus. Moreover, we found that this is an extremely robust mechanism over the addition of new dynamical ingredients, such as synaptic time delays and network attacks (neuron knockdowns). In most of cases, the synaptic weights change are compatible with time scales of few tenths of seconds, in agreement with some of our psychophysical senses (olfaction and vision). Finally, synchronizability of neuronal populations is not required for this effect to take place. *Acknowledgement:* this study was started during LASCON 2012 (IV Latin American School on Computational Neuroscience) and the authors thank support from CAPES, FAPESP and USP.

**Keywords:** Neural coding. Contrast normalization. Statistical physics.

#### Referências:

- 1 MOSQUEIRO, T. S.; MAIA, L. P. Optimal channel efficiency in a sensory network. **Physical Review E**, v. 88, n. 1, p. 12712-1-12712-6, 2013.
- 2 CARANDINI, M.; HEEGER, D. J. Normalization as a canonical neural computation. **Nature Reviews Neuroscience**, v. 13, n. 1, p. 51-62, Jan. 2012.
- 3 KASTNER, D. B.; BACCUS, S. A. Coordinated dynamic encoding in the retina using opposing forms of plasticity. **Nature Neuroscience**, v. 14, n. 10, p. 1317-1322, 2011.

## PG118

### Evaluation of a hybrid docking approach for ligand-receptor interactions.

MUNIZ, H. dos S.<sup>1</sup>; NASCIMENTO, A. S.<sup>1</sup>

heloisadsm@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

The understanding of receptor-ligand interactions is an outstanding step in rational drug discovery. The modeling of ligand binding through the docking approach must have a compromise between the formalism in atomic interactions and the computational cost, aiming the ability to screen thousands to millions of compounds. LiBELa (*Ligand Binding Energy Landscape*) was developed focused on the understanding and solving of this problem through a hybrid approach that combines both ligand- and receptor-based strategies. It is a docking program based on an initial optimization of the screening compound on the active site guided by the physicochemical properties of a reference ligand followed by a local or global Cartesian optimization of the binding energy. Four scoring functions are currently available, based on the evaluation of force field (Amber) interaction energies and smoothed FF interaction energies combined or not with an empirical desolvation term. In order to validate the hybrid method we made several tests with the benchmarks DUD (1), DUD-E (2) and SB2012. (3) The tests done so far showed that the best enrichments are achieved by global optimizers of binding energy combined with FF interaction model. Average  $\log_{AUC}$  values computed indicate an overall performance 35% better than typical docking algorithms for DUD and 70% worse for DUDE. Furthermore, we noticed that different ligand charge methods can affect the docking results, within the DUD benchmark. A deeper evaluation of the effects of the charge method is also on the way.

**Keywords:** Molecular docking. Receptor-ligand interactions. Scoring functions.

#### Referências:

- 1 HUANG, N.; SHOICHET, B. K.; IRWIN, J. Benchmarking sets for molecular docking. **Journal of Medicinal Chemistry**, v.49,p.23, p. 6789-6801,2006.
- 2 MYSINGER, M. M.; CARCHIA, M.; IRWIN,J.; SHOICHET, B. K. . Directory of useful decoys, enhanced (DUD-E): better ligands and decoys for better benchmarking. **Journal of Medicinal Chemistry**, v.55, n.14, p.6582-6594 ,2012.
- 3 MUKHERJEE, S.; BALIUS, T. E.; RIZZO, R. C. Docking validation resources: protein family and ligand flexibility experiments. **Journal of Chemical and Information and Modeling**, v.50, n.11, p.1986-2000, 2010.

## PG119

### Férmions de Majorana em isolantes magnéticos

NATORI, W. M. H.<sup>1</sup>; PEREIRA, R. G.<sup>1</sup>

wmhnatori@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Férmions de Majorana são férmions cuja partícula é idêntica à antipartícula. Eles ganharam interesse renovado em Matéria Condensada por aparecerem naturalmente como excitações em teorias descrevendo certos estados de efeito Hall fracionário, sistemas de spin interagentes e supercondutores topológicos. É possível também utilizá-los para representar spins em modelos interagentes, incluindo alguns em que o estado fundamental está na fase líquido de spin. Esta fase se difere das fases magnéticas ordenadas (ferromagnética, antiferromagnética) por não apresentar uma transição de fase em que exista quebra espontânea de simetria; por causa disso, o espectro de excitações de baixa energia não é caracterizado por mágnons. Experimentalmente, verificaríamos um contínuo de excitações fracionárias em espalhamento de nêutrons. Uma das razões para estudá-los foi uma proposta de P. W. Anderson de 1973 para explicar o mecanismo de supercondutividade de alta temperatura crítica. Atualmente, o interesse teórico também é motivado pela presença de excitações fracionárias e ordem topológica nesses materiais. Nos últimos anos, foram verificadas evidências experimentais de que alguns materiais são de fato bons candidatos a líquidos de spin, como o isolante  $EtMe_3Sb[Pd(dmit)_2]_2$  (efetivamente uma rede de spins triangular de spins 1/2) e o composto  $ZnCu_3(OD)_6Cl_2$  (spins 1/2 na rede kagomé). (1) A representação de Majorana para spins voltou à moda desde a descoberta de que ela pode ser utilizada para resolver exatamente o modelo de Kitaev na rede hexagonal. Neste modelo, a interação (do tipo XX, YY ou ZZ) entre spins se dá entre primeiros vizinhos com intensidades dependentes da direção de ligação na rede. (2) O modelo é resolvido exatamente reduzindo a hamiltoniana original a uma hamiltoniana quadrática em operadores de Majorana que estão inseridos em um campo de gauge  $Z_2$  estático. Não é claro em que situação tal modelo poderia descrever um sólido real, mas já existem propostas para implementar este modelo em redes de átomos frios. Um foco de interesse deste modelo é o aparecimento de ânions (partículas com potencial para uso em computação quântica) como excitações das fases com gap. Do ponto de vista deste projeto, o fato do modelo de Kitaev ser exatamente solúvel e apresentar fases topológicas não triviais o torna um ponto de partida ideal para o estudo de outros modelos de spin, incluindo aqueles que levam a uma fase de líquido de spin. Nesse trabalho, revisamos os elementos fundamentais para estudar modelos de spin interagentes usando a representação de Majorana através do modelo de Kitaev, de maneira a obter sua solução exata e seu diagrama de fase. Inspirado por esta solução exata, formularemos uma teoria de campo médio para o modelo de Heisenberg também nesta representação. (3) Posteriormente estas mesmas técnicas serão utilizadas para estudar um modelo mais realista - modelo spin orbital na rede fcc, que descreve compostos de perovskitas duplas ordenadas com íons de metais de transição 4d ou 5d. Este modelo apresenta as interações frustradas necessárias para estabilizar a fase líquido de spin e que estão ausentes no modelo de Heisenberg.

**Palavras-chave:** Férmions de Majorana. Líquidos de spin. Sistemas fortemente correlacionados.

### Referências:

- 1 HAN, T.-H. et al. Fractionalized excitations in the spin-liquid state of a kagome-lattice antiferromagnet. **Nature**, v. 492, p. 406-410, Dec. 2012. doi: 10.1038/nature11659.
- 2 KITAEV, A. Anyons in an exactly solved model and beyond. **Annals of Physics**, v. 321, n. 1, p. 2-111, Jan. 2006.
- 3 TSVELIK, A. M. **Quantum field theory in condensed matter physics**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 360 p.

## PG120

### Microscopia por geração de soma de frequências

OITICICA, P. R. A.<sup>1</sup>; MIRANDA, P. B.<sup>1</sup>

praoitica@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Interfaces líquido-ar, metal-polímero, sólido-líquido vem sendo estudadas pela espectroscopia vibracional por geração de soma de frequências>(1) Trata-se de uma técnica baseada no fenômeno não linear que permite obter o espectro vibracional e a orientação molecular média em interfaces. Apresentamos o desenvolvimento e construção de um microscópio de geração ressonante de soma de frequências e a sua utilização para estudo de interfaces líquido-ar e metal- polímero. (2) Utilizamos um laser pulsado largura de 25 ps, taxa de repetição de 20 Hz em 1064 nm que bombeia um gerador de harmônicos gerando um feixe em 532 nm e um UV em 355 nm que se combinam em um gerador paramétrico óptico, amplificador paramétrico, gerando visível sintonizável e infra vermelho médio sintonizável entre 10000 e 2700 nm. Para gerar soma de frequências combinamos o feixe de laser verde em 532 nm com o infravermelho que sintonizamos na frequência de vibração ressonante do material em estudo.

**Palavras-chave:** Microscopia. Geração de soma de frequências. Óptica não linear.

#### Referências:

- 1 SHEN, Y. R. Surface nonlinear optics . **Journal of the Optical Society of America B**, v.28, n. 12, p. A56-A66, 2011.
- 2 FLORSHEIMER, M.; BRILLERT, C.; Fuchs, H. Chemical imaging of interfaces by sum-frequency generation. . **Materials Science and Engineering C**, v. 8-9, p. 335-341, 1999.

## PG121

### Hybrid organic-inorganic photochromic xerogels studied by solid state nuclear magnetic resonance and electronic paramagnetic resonance

OLIVEIRA JUNIOR, M.<sup>1</sup>; SCHNEIDER, J. F.<sup>1</sup>; RODRIGUES FILHO, U. P.<sup>2</sup>; MAGON, C. J.<sup>1</sup>

mjunior@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Hybrid materials based in dodecatungstophosphoric acid (HPW) show reversible photochromic properties in the 200nm-390nm UV range. (1) The photochemical reduction of the HPW polyanions yields blue-colored species, a property that makes these materials suitable for UV sensors or personal dosimeters. The strength and duration of the photochromic response depend on the nature of the organic groups interacting with the polyanion, and on the hydration level of the sample. The understanding of the physicochemical mechanisms of the photochromic effect and the structure of these materials are fundamental issues to optimize formulations and preparation conditions. A key aspect to be analyzed is the interaction between the polyanion and the neighboring chemical species, such as hydrates and organic functionalities of the silica matrix, which determines the feasibility for charge transfer necessary to reduce the polyanion. The objective of this work is to obtain a description of the hydration environment around the HPW polyanion, using NMR and EPR techniques. Studies were conducted in several photochromic xerogels and in HPW hexahydrate (HPW·6H<sub>2</sub>O), which is a convenient model to analyze local order and the effect of the atmosphere during the preparation stages. Two atmosphere conditions were tested during preparation: (i) ambient, and (ii) continuous nitrogen flow (RH<15%). Using <sup>1</sup>H-MAS-NMR, <sup>1</sup>H-<sup>29</sup>Si heteronuclear correlation (HETCOR), and spin-lattice relaxation time measurements in the rotating frame (T<sub>1ρ</sub>), four sets of H species were identified: free H<sub>2</sub>O, loosely bond water clusters H<sup>+</sup>(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>, species strongly interacting with HPW (H<sub>2</sub>O/H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>/H<sub>5</sub>O<sub>2</sub><sup>+</sup>), and species from the ormosil (SiOH and CH). <sup>31</sup>P-NMR, <sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P cross polarization and <sup>31</sup>P-<sup>1</sup>H spin-echo double resonance (SEDOR) revealed the dispersion of the HPW ions within the hybrid, occupying sites with a high number of neighbor protons. Condition (ii) yields stable and reproducible xerogels, with very low amounts of free/loose water. Xerogels prepared under condition (i) show higher amounts of free/loose water, which might be partially removed with thermal treatments, causing a decrease in H-P distances and an increase in the relative mobility hydrogen-polyanion. The EPR experiments carried out in irradiated samples showed a thermally activated hopping process of an unpaired electron, possibly transferred from organic functionalities. A transition from a localized electronic state at low temperatures (<30K) to a delocalized one at higher temperatures was observed. The EPR spectra also show dynamical differences dependent on the composition of the hybrid material, which could be traced to differences in the photochromic response. The xerogels prepared in low-humidity conditions showed lower EPR signal intensity than the xerogels prepared in ambient conditions. This is consistent with the observed decrease in photochromic response in dehydrated samples, revealing that more remote hydration species have an influence on the reduction

of the HPW polyanions.

**Keywords:** Phosphotungstic acid. Solid state NMR. Hybrid materials.

**Referências:**

1 OLIVEIRA JUNIOR, M.; SOUZA, A. L.; SCHNEIDER, J.; RODRIGUES FILHO, U. P. Local structure and photochromic response in ormosils containing dodecatungstophosphoric acid. **Chemistry of Materials**, v. 23, n. 4, p. 953-963, 2011.

## PG122

### **Modelagem molecular da enzima AOX de *m. pernicioso*: alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de novos agroquímicos para a vassoura-de-bruxa.**

OLIVEIRA, A. A.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>; LIMA, G. M. A.<sup>1</sup>

andrew@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A doença vassoura-de-bruxa tem devastado a produção de cacau no Brasil. No início do século XXI, quando foi introduzida a doença, o país teve sua produção anual reduzida de 320 mil para atuais 176 mil toneladas, diminuindo a sua participação no mercado internacional de 14,8% para 6,7%. Além disso, 2,5 milhões de pessoas dependem diretamente do cultivo do cacau.(1) Tais dados demonstram o impacto que a presença do fungo *Moniliophthora pernicioso* tem causado na produção brasileira. Frente a este problema, foi criado, em 2000, o projeto genoma da vassoura de bruxa e até hoje são dispendidos esforços para o controle do fitopatógeno. O agente causador da fitopatologia é um basidiomiceto hemibiotrófico, com dois tipos de micélios que caracterizam as fases da doença: biotrófica (parasitária e longa, por volta de 30 dias) e saprotrófica (nutrição por tecidos mortos). Acredita-se que uma via respiratória alternativa (alternative oxidase - AOX) apareça como um mecanismo de resistência contra o estresse causado pela planta quando infectada, como o acúmulo de radicais livres, e que seria crucial para a alternância das fases miceliais. O presente trabalho tem como objetivo a determinação da estrutura 3D da AOX de *M. pernicioso* por modelagem comparativa bem como a descoberta de inibidores como candidatos a novos agroquímicos. A coleta de informação sobre a enzima AOX resultou na identificação e análise de 150 sequências homólogas que indicaram elevado nível de conservação dos resíduos do sítio catalítico da proteína. A estrutura 3D da AOX de *Trypanosoma brucei* encontra-se disponível no banco de dados PDB e foi utilizada com molde para o desenvolvimento dos estudos de modelagem molecular comparativa. O modelo da AOX de *M. pernicioso* foi obtido com auxílio do servidor Protinfo,(2) que emprega um abordagem integradas para a construção de modelos moleculares, incluindo: (1) Modelagem Molecular, (2) Reconhecimento de Enovelamentos e (3) Metodologia de novo. O valor da raiz quadrada do desvio médio (RMSD, do inglês, root mean square deviation) entre os carbonos alfa da estrutura molde e o modelo construído foi de 0,17Å, sugerindo elevada similaridade estrutural entre as proteínas homólogas. Estudos de docagem molecular com o programa GOLD3 foram empregados para validar a modelo estrutural construído de AOX de *M. pernicioso*. Os resultados indicaram que o modelo foi capaz de reconhecer o substrato natural e reproduzir o modo de ligação observado na estrutura homóloga de *T. brucei* (rmsd < 2 Å). A utilização da estratégia de modelagem comparativa foi útil para a construção de um modelo molecular da enzima AOX de *M. pernicioso*. Esses dados representam as primeiras informações sobre um alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de novos agroquímicos para o controle da vassoura-de-bruxa.

**Palavras-chave:** Vassoura-de-bruxa. Oxidase alternativa. Modelagem molecular.

**Referências:**



- 1 COMISSÃO Executiva do plano da lavoura cacaueira, 2013. Disponível em: <<http://www.ceplac.gov.br/>>. Acesso em: 30 jul. 2013.
- 2 KITTICHOTIRAT, W.; GUERQUIN, M.; BUMGARNER, R.E.; SAMUDRALA, R. . Protinfo PPC: a web server for atomic level prediction of protein complexes. **Nucleic Acids Research**, v. 37, p. W519-25, 2009. doi: 10.1093/nar/gkp306.
- 3 HARTSHORN, M. J.; VERDONK, M. L.; CHESSARI, G.; BREWERTON, S. C.; MOOIJ, W. T. M.; MORTENSON, P. N.; MURRAY, C. W. Diverse, high-quality test set for the validation of protein-ligand docking performance. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 50, n.4, p. 726-741, 2007. .

## PG123

# Desenvolvimento de técnica de alinhamento óptico de um telescópio TMA

OLIVEIRA, A. O.<sup>1</sup>; SCADUTO, L. C. N.<sup>1</sup>; CASTRO NETO, J. C.<sup>1</sup>

andre.orlandi.oliveira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Sistemas embarcados em satélites sofrem grandes cargas de lançamento e altas variações de temperatura quando em órbita. Tais fatores podem afetar drasticamente o desempenho do sistema se este não for robusto quanto a desalinhamentos. Análises de tolerâncias de fabricação de sistemas reflexivos devem levar em consideração não apenas variações nas superfícies dos espelhos, mas também possíveis alterações em toda a estrutura do satélite. Schmid (1) demonstrou usando a teoria nodal de aberrações que, em um sistema TMA, a aberração dominante devido ao desalinhamento é o termo de astigmatismo de terceira ordem com uma dependência com o campo de visada, chamado de astigmatismo linear ou *field-assymeric, field-linear 3rd order astigmatism*. Além disso, Schmid (1) também demonstrou que um sistema TMA que apresenta excelente desempenho no eixo óptico, não está necessariamente alinhado. Isso ocorre porque o novo termo de astigmatismo, presente devido ao desalinhamento de um ou mais elementos, é sempre nulo no eixo óptico, mesmo que este termo seja grande ao longo do campo de visada. O conhecimento e a quantificação deste novo termo de aberração, que aparece devido a desalinhamentos, são de grande importância no processo de alinhamento de um TMA. Muitos estudos já foram realizados no caso do alinhamento de sistemas telescópicos com dois espelhos. Na prática, quando um sistema de dois espelhos está desalinhado, ele apresenta coma no field central. O que se busca no processo de alinhamento destes sistemas é reduzir ou eliminar o coma no field central através do descentro ou inclinação do secundário em relação ao primário. Contudo, na última década, através da teoria nodal de aberrações, foi constatado que este procedimento não é completo e que o sistema continuará apresentando baixo desempenho nos fields extremos. (2) Da mesma forma, para sistemas anastigmáticos com três espelhos, também é possível prever o seu comportamento com relação a desalinhamentos. Em um TMA, assim como em um sistema com dois espelhos, o surgimento de um termo de coma no eixo óptico também caracteriza a presença de desalinhamentos no sistema óptico. Além disso, a teoria nodal de aberrações também prevê o surgimento de um termo adicional de astigmatismo linear. É importante ressaltar que, de forma geral, este novo termo de aberração permanece centrado no eixo óptico, podendo ocasionar a permanência de elementos desalinhados no sistema se este for alinhado apenas utilizando os dados obtidos no eixo óptico do sistema. Logo, o alinhamento de um sistema TMA deve ser realizado por meio de medidas no eixo óptico e medidas fora do eixo. Múltiplas medidas fora do eixo devem ser realizadas para se garantir um alinhamento razoável do sistema. (1) Pode-se concluir, portanto, que o conhecimento dos efeitos causados quando desalinhamentos estão presentes num sistema óptico composto por três espelhos é de fundamental importância para o correto alinhamento do conjunto. Basicamente coma e astigmatismo são afetados quando desalinhamentos estão presentes num sistema TMA, que por definição são corrigidos para coma e astigmatismo de terceira ordem. (1)

**Palavras-chave:** Three mirror anastigmat telescope. Astigmatismo linear. Alinhamento óptico.

### Referências:

- 1 SCHMID, T; THOMPSON, K; ROLLAND, J. Alignment induced aberration fields of next generation telescope. **Proceedings of the SPIE**, v. 7068, p. 70680E, 2008.doi: 10.1117/12.797143 .
- 2 SCHMID, T; THOMPSON, K; ROLLAND, J. Alignment of two mirror astronomical telescopes (the astigmatic component). **Proceedingsof the SPIE**, v. 7017, p. 70170C, 2008.doi:10.1117/12.791263.

## PG124

### Refratômetro diferencial para medida simultânea de Brix e sacarose

OLIVEIRA, A. R.<sup>1</sup>; DOMENEGUETI, J. F. M.<sup>1</sup>; ZÍLIO, S. C.<sup>1</sup>

anderson.roberto.oliveira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho apresentamos uma nova técnica para a medida da quantidade de substâncias opticamente ativas em uma solução. O método se baseia na interferência entre as polarizações  $s$  e  $p$  da luz polarizada a  $45^\circ$  (1) ao incidir nas proximidades de sofrer reflexão total interna (2) em uma interface entre vidro e ar. A reflexão impõe uma fase adicional a essas componentes tal que, ao serem projetadas na direção da polarização inicial, a interferência é destrutiva somente no ângulo crítico. Caso uma das componentes seja maior que a outra, a posição deste mínimo é deslocada. Isso pode ser obtido fazendo com que a luz atravesse um meio opticamente ativo anteriormente à incidência na interface, provocando uma rotação na polarização da luz. A posição do mínimo de intensidade, então, dá a informação do grau de rotação da polarização imposta pelo meio e, conseqüentemente, da concentração de substância opticamente ativa. Por ser uma técnica diferencial, é necessária uma calibração do sistema. (3) O método tem grandes possibilidades para o desenvolvimento de um aparelho para utilização na indústria sucroalcooleira.

**Palavras-chave:** Refratometria. Reflexão total interna. Dispositivos ópticos.

#### Referências:

- 1 ZILIO, S. C. A simple method to measure critical angles for high-sensitivity differential refractometry. **Optics Express**, v. 20, n. 2, p. 1862-1867, 2012.
- 2 KUKHARCHIK, P. D.; SERDYUK, V. M.; TITOVITSKII, I. A. Total internal reflection of a Gaussian light beam. **Technical Physics**, v. 44, n. 4, p. 417-421, 1999.
- 3 RIBEIRO, L. P. D.; ROHWEDDER, J. J. R.; PASQUINI, C. A new approach to polarimetric measurements based on birefringent crystals and diode lasers. **Analytica Chimica Acta**, v. 771, p. 1-6, 2013. doi: 10.1016/j.aca.2013.02.015 .

## PG125

### Relaxação transversal em meios porosos: métodos de RMN e simulação computacional

OLIVEIRA, E. L.<sup>1</sup>; OLIVEIRA-SILVA, R.<sup>1</sup>; MONTRAZI, E. T.<sup>1</sup>; VIDOTO, E. L. G.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>

everton.lucas.oliveira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma importante técnica aplicada na caracterização de meios porosos como rochas, ossos, cerâmicas e cimentos. As medidas das distribuições de tempos de relaxação longitudinal, transversal (T1,T2) e o coeficiente de difusão translacional (D) do fluido presente nestes sistemas contêm importantes informações do meio, tal como permeabilidade, molhabilidade, porosidade e susceptibilidade. Para extrair tais propriedades é necessário medir individualmente as distribuições dos tempos de relaxação T1 e T2 por meio dos métodos de Inversão Recuperação e CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill), respectivamente. Também é indispensável o uso de métodos bidimensionais de correlação T2xT2 Exchange e DxT2. (1,2) Os objetivos desse trabalho envolvem a realização de simulação computacional e experimentos de modo a determinar propriedades morfológicas e físico-químicas dos meios porosos. Atualmente, através dos métodos de "random walk" e Monte Carlo, é possível reproduzir o movimento molecular Browniano. A proposta do trabalho é combinar duas abordagens de "random walk", na posição e no espaço de fase (1,2), para simular a relaxação do fluido no meio poroso, levando em consideração a defasagem dos spins devida tanto às colisões dos núcleos com a parede dos poros quanto entre si. A relação entre a distribuição de T2 e algumas propriedades do meio poroso, principalmente sua morfologia e suas características físico-químicas, que descrevem a dinâmica do fluido em tais materiais, podem ser reproduzidas na simulação. Os meios porosos mais estudados em nosso Grupo são rochas sedimentares. No entanto, para melhor testar as simulações e experimentos propostos, estamos estudando meios porosos artificiais, que apresentam propriedades bem determinadas, por exemplo: conjuntos de microesferas de vidro e cerâmicas de alumina. (3) Em termos computacionais, os modelos reais e virtuais são usados como condições de contorno, onde a morfologia porosa é representada por uma matriz 3D em que cada elemento denominado voxel (unidade gráfica) representa uma unidade de volume (V). As regiões porosas dos sistemas reais são reconstruídas computacionalmente através de imagens obtidas por microtomografia de raios-X 3D (micro-CT scanning) e a resolução das imagens definem o voxel. Para modelos virtuais utilizam-se dois diferentes sistemas de esferas: modelo de dois ou mais poros esféricos interconectados, e empacotamento de esferas. O decaimento simulado, obtido pelos métodos desenvolvidos, são comparados com os resultados experimentais obtidos por CPMG, onde a correlação entre taxas de colisão e valores de T2 são analisadas. A perspectiva do projeto é aplicar o método computacional proposto nos meios porosos artificiais com morfologias bem conhecidas, e reproduzir os mapas de correlação bidimensional nas simulações.

**Palavras-chave:** Ressonância magnética nuclear (RMN). Meios porosos. Técnicas bidimensionais .

**Referências:**

- 1 D'EURYDICE, M. N. **Desenvolvimento de metodologias para o estudo de meios porosos por ressonância magnética nuclear**. 2011. 172 p. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.
- 2 OLIVIERI, A. C. Illustrating transverse (T2) NMR relaxation with a microcomputer. **Concepts in Magnetic Resonance**, v. 9, n. 5, p. 337-346, 1997.
- 3 MONTRAZI, E. T. **Estudo de cerâmicas porosas de alumina através da medida de tempos de relaxação via ressonância magnética nuclear**. 2012. 164 p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

## PG126

# Estudo sobre a adiabaticidade em ressonância magnética nuclear

ONCEBAY SEGURA, C.<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>

charlieoncebay@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Em trabalhos de Informação Quântica (IQ) via Ressonância Magnética Nuclear (RMN), as interações dependentes do tempo impostas por um agente externo, geralmente, são variadas lentamente para se manter a adiabaticidade e controlar o estado final do sistema quântico. (1) No entanto há muitos casos em que precisamos acelerar as operações quânticas, já que se estas demorarem muito não resultariam práticas para aplicações com muitas repetições. Como ocorre, por exemplo, na manipulação da informação quântica por transporte de íons ou átomos. Além disso, em muitos experimentos, como em relógios atômicos, as altas taxas de repetição contribuem na obtenção de melhores relações sinal/ruído e também melhora a precisão. Etapas adiabáticas também são um gargalo em alguns processos cíclicos. Eles determinam, por exemplo, as taxas de resfriamento em refrigeradores quânticos e quantifica a intangibilidade do zero absoluto. No presente projeto, pretendemos estudar atalhos para a adiabaticidade com o propósito de acelerar operações quânticas no contexto da Ressonância Magnética Nuclear. (2-3) Proporemos novos protocolos de processamento da informação quântica baseados nesses atalhos, pois os mesmos aumentaram a rapidez das operações quânticas que queremos efetuar.

**Palavras-chave:** RMN. Atalhos para a adiabaticidade. Fases de Berry.

### Referências:

- 1 BERRY, M. V. Transitionless quantum driving. **Journal of Physics A**, v. 42, n. 36, p. 365303-1-365303-9, 2009.
- 2 DEMIRPLAK, M.; RICE, S. A. Adiabatic population transfer with control fields. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 107, n. 46, p. 9937-9945, 2003.
- 3 CHEN, X.; TORRONTAGUI, E.; MUGA, J. G. Lewis-Riesenfeld invariants and transitionless quantum driving. **Physical Review A**, v. 83, n. 6, p. 062116-1-062116-8, 2011.

## PG127

### The interaction between human protein S100A9 and the parasite *Schistosoma mansoni* s protein MEG-14

ORCIA, D.<sup>1</sup>; DeMARCO, R.<sup>1</sup>; MACEDO, J. N. A.<sup>1</sup>

debbyorcia@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

MEG14 is a protein encoded by a micro-exon gene (MEG) from the parasite *S. mansoni*, a causative agent of schistosomiasis. The MEGs are capable to produce a pool of variant secreted proteins by alternative splicing of micro-exons (1). Previous studies using the protein MEG14 as bait against a library of human leukocytes in yeast two-hybrid assay showed that S100A9 protein is a potential partner for protein MEG14. It has been previously described that S100A9 protein plays a role in the modulation of human immune system (2). This interaction was confirmed in a Pull Down experiment. In order to obtain further information about this interaction, the technique of Isothermal Titration Calorimetry was used and the resulting thermogram indicates that the interaction between the proteins is an exothermic process. The binding curve shows that the process has positive entropy and negative enthalpy suggesting that this reaction is entropically driven. The data indicated an affinity constant at the order of micro molar and a stoichiometry of 1:1. Further experiments are being performed to confirm and understand how this interaction occurs. This data might provide better understanding of host-parasite relationship and provide insights about the modulation of immune system from humans.

**Keywords:** *Schistosoma mansoni*. Micro-exons. S100A9.

#### Referências:

- 1 DEMARCO, R.; MATHIESON, W.; MANUEL, S.J.; DILLON, G.P.; CURWEN, R.S.; ASHTON, P.D.; IVENS, A.C.; BERRIMAN, M.; VERJOVSKI-ALMEIDA, S.; WILSON, R.A. Protein variation in blood-dwelling schistosome worms generated by differential splicing of micro-exon gene transcripts. **Genome Research**, v. 20, n. 8, p. 1112-1121, 2010.
- 2 GUIGNARD, F.; MAUEL, J.; MARKERT, M. Identification and characterization of a novel human neutrophil protein related to the S100 family . **Biochemical Journal**, v. 309, pt. 2, p. 395- 401, 1995.



## PG128

### **Implementação de metodologias de imagens por ressonância magnética para medidas não invasivas de perfusão sanguínea cerebral**

PASCHOAL, A. M.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>1</sup>

ampaschoal@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A técnica de ressonância magnética (RM) está entre as principais metodologias para a aquisição de imagens para diagnósticos em medicina e tem sido extensivamente utilizada para avaliações e obtenções de imagens do cérebro. Uma das grandes vantagens da RM quando comparada às suas concorrentes é o fato de ser não invasiva, permitindo que os exames sejam repetidos sem nenhum dano cumulativo ao paciente. Em alguns casos, porém, se torna necessário a utilização de um contraste intravenoso, o que favorece a avaliação de determinadas alterações teciduais que podem ou não estar associadas a patologias distintas. Isso é particularmente verdade quando o diagnóstico do paciente depende da avaliação do estado perfusional do tecido para o qual a metodologia padrão é a técnica denominada Dynamic Susceptibility Contrast (DSC) que utiliza o gadolínio como contraste para alteração do sinal de RM durante a passagem do sangue pelo tecido de interesse. Esse método, além da necessidade de utilização de um contraste exógeno, que pode, em alguns casos, resultar em reações que vão desde enjoos até a fibrose sistêmica nefrogênica, síndrome grave que pode levar o paciente à morte, sofre com a dificuldade de modelagem para quantificação absoluta da perfusão sanguínea. Em vista disso, um método que tem sido bastante estudado recentemente e muito promissor é o de Arterial Spin Labeling (ASL). Este método tem como sua principal vantagem o fato de ser completamente não invasivo além de possibilitar a quantificação da perfusão sanguínea cerebral. (1) No decorrer do projeto, pretendemos estabelecer todo o protocolo de aquisição (2-3) e processamento de dados para obtenção de mapas quantitativos de perfusão sanguínea cerebral. Isso vai incluir o estabelecimento de protocolos para a devida obtenção de mapas de tempos de relaxação longitudinal (T1), o que será implementado na fase inicial do presente projeto. Com isso, após a obtenção e processamento de dados, esperamos criar uma plataforma que permita o estudo de parâmetros associados à regulação sanguínea cerebral de forma completamente não invasiva. Isso deve possibilitar não só responder questões sobre a fisiologia por trás de diferentes patologias como também fornecer informações importantes para melhor compreensão de como os parâmetros fisiológicos afetam o sinal de RM, o que pode contribuir substancialmente para o desenvolvimento de novas metodologias de imagens e espectroscopia. Perspectivas futuras incluem a implementação de uma versão pulsada que utilize o conceito de marcação similar à implementação contínua, denominada pseudo-CASL, além de implementações contínuas da técnica com a utilização de um sistema de três bobinas independentes.

**Palavras-chave:** Arterial spin labeling. Ressonância magnética. Perfusão.

**Referências:**

1 KIM, S. G. Quantification of relative cerebral blood flow change by flow-sensitive alternating inversion recovery (FAIR) technique: application to functional mapping. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 34, n. 3, p. 293-301, 1995.

2 WILLIAMS, D. S. et al. Magnetic resonance imaging of perfusion using spin inversion of arterial water. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 89, n. 1, p. 212-216, 1992.

3 DETRE, J. A. et al. Perfusion imaging. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 23, n. 1, p. 37-45, 1992.

## PG129

### Estudos estruturais e funcionais de novos ligantes sintéticos do receptor PPAR gama

PAULA, K.<sup>1</sup>; MAFUD, A. C.<sup>1</sup>; NASCIMENTO, A. S.<sup>1</sup>

karina\_depaula@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho propõe o estudo da atividade de alguns ligantes dos receptores nucleares (RNs), que são uma família de fatores de transcrição gênica, sensíveis a ligantes e estão envolvidos em vários processos metabólicos do organismo. Os receptores ativados por proliferados peroxissomais (PPARs) são RNs com papel importante no metabolismo de glicose, na adipogênese e migração de macrófagos, dentre outros fatores(1). Estes efeitos são mediados pela ação de moléculas endógenas e por duas classes de fármacos: as tiazolidinadionas (TZDs) e os fibratos. O PPARgama (2) é o alvo molecular dos TZDs, empregados no tratamento do diabetes melito do tipo II. Com os achados recentes relatando efeitos colaterais severos associados ao uso dos fármacos desta classe, é crescente a demanda por moléculas alternativas que possam ser empregadas como agentes sensibilizadores da insulina. Desta forma, este projeto visa propor novas moléculas que atuem como ligantes do receptor PPARgama, além de estabelecer as bases moleculares e estruturais da interação ligante-receptor neste sistema biológico. Cinco ligantes foram inicialmente selecionados para caracterização in vitro e estrutural. Todos estes ligantes foram identificados como ligantes do receptor PPARgama em projetos anteriores desenvolvidos no grupo. Quatro ligantes sintéticos são oriundos de campanhas baseadas na estrutura do receptor e um fármaco já aprovado é oriundo de campanha baseada na estrutura do ligante rosiglitazona.

**Palavras-chave:** Receptores nucleares. Ligantes sintéticos. Cristalografia de raios-X.

#### Referências:

- 1 ISSEMAN, I.; GREEN, S . Activation of a member of the steroid hormone receptor superfamily by peroxisome proliferators. **Nature**, v. 347,n. 6294, p. 645-650, 1990.
- 2 HARMON, G. S.; LAM, M. T.; GLASS, C. K. PPARs and lipid ligands in inflammation and metabolism. . **Chemical Reviews**, v. 111, n. 10, p. 6321-6340, 2011.

## PG130

### Planejamento, síntese e avaliação biológica de novos inibidores da enzima cruzaina de *Trypanosoma cruzi*

PAULI, I.<sup>1</sup>; FERREIRA, R. S.<sup>2</sup>; DESSOY, M. A.<sup>3</sup>; SOUZA, M. L. de<sup>1</sup>; SALES, A. I. L.<sup>1</sup>; KROGH, R.<sup>1</sup>; DUARTE, S. M.<sup>1</sup>; DIAS, L. C.<sup>3</sup>; OLIVA, G.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

ivanipauli@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Departamento de Bioquímica e Imunologia – UFMG

<sup>3</sup>Laboratório de Química Orgânica Sintética – UNICAMP

A doença de Chagas é considerada uma doença tropical negligenciada de alta prioridade nos programas de pesquisa e desenvolvimento da Organização Mundial da Saúde (OMS).(1) A farmacoterapia disponível para esta doença é extremamente deficiente devido, principalmente, à baixa eficácia e à alta toxicidade (2), tornando urgente e essencial o desenvolvimento de novos agentes quimioterápicos mais eficazes e menos tóxicos. Devido à sua importância biológica, a cruzaina é um dos alvos terapêuticos mais importantes para o desenvolvimento de novos antichagásicos. Esta enzima é expressa durante todo o ciclo de vida do *Trypanosoma cruzi*, sendo fundamental para a sua nutrição e desenvolvimento, evasão do sistema imune e invasão celular do hospedeiro. Neste contexto, o objetivo do nosso trabalho é o desenvolvimento de novos inibidores da cruzaina por meio da combinação de abordagens de química medicinal e sintética (planejamento baseado na estrutura, modelagem molecular, síntese orgânica, avaliação bioquímica e biológica). Relatamos aqui a otimização molecular, com base na estrutura, de uma classe de inibidores não covalentes da cruzaina, iniciando com um inibidor previamente co-cristalizado com a enzima,  $K_i = 0.8 \text{ } \mu\text{M}$ . (3) Com o objetivo de estabelecer relações estrutura.atividade (SAR), sintetizamos e testamos uma série de mais de 40 análogos, o que permitiu a identificação de um inibidor competitivo bastante promissor (3r,  $\text{IC}_{50} = 200 \text{ nM}$ ,  $K_i = 82 \text{ nM}$ ), cerca de 100 vezes mais potente do que o composto líder. Esta série de compostos apresenta resultados extremamente relevantes para o desenvolvimento de candidatos a novos antichagásicos. Além disso, diversos novos inibidores foram planejados, sintetizados e avaliados biologicamente. Vários deles apresentaram atividade *in vitro* contra o *T. cruzi* ( $\text{IC}_{50}$  variando entre 1,6 e 35  $\mu\text{M}$ ), sendo em alguns casos mais potentes do que o benzonidazol ( $\text{IC}_{50} = 4,8 \text{ } \mu\text{M}$ ), utilizado atualmente na terapia da doença de Chagas. Também foi demonstrado que os compostos apresentam níveis seguros de toxicidade em modelos experimentais em camundongos.

**Palavras-chave:** Planejamento de fármacos. Doença de chagas. Cruzaina.

#### Referências:

1 COURA, J. R.; VIÑAS, P. A. Chagas disease: a new worldwide challenge. **Nature**, v. 465, n. 7301, p. S6-S7, 2010.

2 CLAYTON, J. Chagas disease: pushing through the pipeline. **Nature**, v. 465, p. S12-S15, 2010.doi:10.1038/nature09224.

3 FERREIRA, R. S.; SIMEONOV, A.; JADHAV, A.; EIDAM, O.; MOTT, B. T.; KEISER, M. J.; McKERROW, J. H.; MALONEY D. J.; IRWIN, J. J.; SHOICHET, B. K. Complementarity between a docking and a high-throughput screen in discovering new cruzain inhibitors. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 53, n. 13, p. 4891-4901, 2010.

## PG131

### Production and investigation in a two-component BEC

PEDROZO-PENAFIEL, E<sup>1</sup>; PAIVA, R. R<sup>1</sup>; VIVANCO, F. J<sup>1</sup>; KRUGER, A<sup>1</sup>; CASTILHO, P<sup>1</sup>; THOMPSON, K. J<sup>1</sup>; FARIAS, K. M<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S<sup>1</sup>

edwin@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work we are dealing with a mixture of Na/K Bose-Einstein Condensates (BEC). With the mixture of these two superfluids, we are going to investigate the effects of transferring quantum excitations, collective excitations and vortices, as well. Effects of modulation of the scattering length and excitation are being reviewed and will be object of investigation in the BEC of K and we will try to verify the thermalization with the second specie (Na). Our experimental system being mounted is a composition of two independently systems, Na and K. We are going to produce a trap of Na atoms from a 2D MOT (1) and the same for K. They will be combined to produce a single working chamber with two traps and finally the two condensates. In this presentation, we will show the state of the art of our work. We will present also the next steps we plane to follow for the next months. Today, condensates of mixtures of bosons of different species or the same species in different hyperfine states in various types of traps has allowed great progress in several areas. There are many studies in mixtures of bosons-bosons and bosons-fermions systems, also in BECs of non-alkali atoms in controlling the interaction between the condensed atoms with Feshbach resonances. Many other systems extremely interesting remain fairly broad horizon of the phenomena to be studied in this area. Among these perspectives are studies involving quantum vortices (2) and collective quantum excitations. In a previous work developed in our group (3) was reported the experimental observation of vortex tangles in an atomic Bose-Einstein condensate of <sup>87</sup>Rb atoms applying an external oscillatory perturbation to the trap. Other characteristic signatures concerning the turbulence are also shown, such the suppression of the aspect ratio inversion typically observed in quantum degenerate bosonic gases during free expansion.

**Keywords:** Condensation. Quantum turbulence. Mixtures of BEC.

#### Referências:

- 1 LAMPORESI, G. et al. Compact high-flux source of cold sodium atoms . **Review of Scientific Instruments**, v. 84, n. 6, p. 063102-1 - 063102-7, 2013.
- 2 MATTHEWS, M. R. et al. Vortices in a Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 13, p. 2498-2501, 1999.
- 3 HENN, E. A. L. et al. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301-1 - 045301-4, 2009.

## PG132

### Caracterização de estado sólido do fumarato de dietilcarbamazina

PEPINO, R. O.<sup>1</sup>; SILVA, C. C. P.<sup>2</sup>; ELLENA, J.<sup>2</sup>

rebeka@iqsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A dietilcarbamazina(DEC) é utilizada na sua forma de sal citrato para tratamento da filariose linfática (FL). (1) Essa doença é transmitida por meio de picadas de mosquitos e pode levar a edemas doloridos que desfiguram órgãos genitais e/ou pernas. (2) Também conhecida como elefantíase, a FL acarreta, além de debilitação física, um grave impacto socioeconômico sobre a vida do portador. (3) Estudos revelaram que a forma citrato apresenta transições de fase sólido-sólido a baixa temperatura. (1) Nesse contexto, visando seu aperfeiçoamento farmacológico, nesse trabalho, desenhou-se um novo cristal, o fumarato de dietilcarbamazina, que após obtido foi submetido a análise estrutural. O estudo permitiu avaliar as interações intermoleculares e associar a elas as diferenças encontradas no ponto de fusão em relação à forma sólida administrada e a outras formas estudadas pelo grupo. Esta informação permite verificar como as alterações estruturais afetam a estabilidade do fármaco e, dessa forma, promove as condições necessárias para que seja possível aprimorar as propriedades físico-químicas dos fármacos.

**Palavras-chave:** Estado sólido. Fumarato de dietilcarbamazina. Polimorfismo.

#### Referências:

- 1 RIBEIRO, L. **Caracterização de estado sólido e análise computacional de uma nova forma cristalina do fármaco antifilariose dietilcarbamazina:** um sal de ácido maléico. 2011. 117 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.
- 2 SILVA, C.C.P. **Caracterização de estado sólido de insumos farmacêuticos ativos:** clorpropamida, nevirapina e dietilcarbamazina. 2010. 187 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 3 OTTESEN, E. A. Lymphatic filariasis: treatment, control and elimination. **Advances in Parasitology**, v. 61, p. 395-44, 2006. doi:10.1016/S0065-308X(05)61010-X .

## PG133

### Synchronization in random clustered networks

PERON, T. K. D. M.<sup>1</sup>; RODRIGUES, F. A.<sup>2</sup>; KURTHS, J.<sup>3</sup>

thomaskaue@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

<sup>3</sup>Department of Physics - Humboldt University

Synchronization processes are observed in many physical, biological, chemical, technological and social systems. These systems can be described and modelled through the theory of complex networks, in a way that the full comprehension of the emergence of collective behavior in these complex systems will only be achieved by theories that encompass the interaction of its elements. In this work we study synchronization of random clustered networks consisting of Kuramoto oscillators. More specifically, by developing a mean-field analysis, we find that the presence of cycles of order 3 does not play an important role with regard to network synchronization, showing that the synchronization of random clustered networks can be described by tree-based theories, even for high values of clustering. (1) In order to support our findings, we provide numerical simulations considering clustered and nonclustered networks, which are in good agreement with our theoretical results. (1) The obtained results contribute for the better understanding of the interplay between topology and dynamics in networks.

**Keywords:** Complex networks. Synchronization. Dynamical systems.

#### Referências:

1 PERON, T. K. D. M.; RODRIGUES, F. A.; KURTHS, J. Synchronization in random clustered networks. **Physical Review E**, v. 87, n. 3, p. 032807-1-032807-6, 2013.



## PG134

### Estudo da distribuição de elementos transponíveis nos íntrons ortólogos das espécies *Chlamydomonas reinhardtii* e *Volvox carteri*

PHILIPPSEN, G. S.<sup>1</sup>; DE MARCO, R.<sup>1</sup>

gistrieder@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Elementos transponíveis (TEs) são sequências de DNA que possuem a capacidade de transposição nos genomas. (1) A integração dos mesmos em regiões adjacentes ou internas aos genes pode alterar a regulação e expressão destas estruturas. Segundo Zhang et al. (2), o conhecimento acerca da distribuição de TEs no interior dos íntrons ainda é bastante limitado, assim como o motivo pelo qual alguns elementos no contexto intrônico perturbam a transcrição do gene enquanto outros não o fazem. Neste contexto, o intuito deste trabalho é apresentar alguns resultados advindos do estudo computacional acerca da distribuição de TEs nos íntrons dos genes ortólogos de *Chlamydomonas reinhardtii* e *Volvox carteri*. (3) Os resultados apontam que a frequência de ocorrência das classes de TEs (LTR, non-LTR, DNA-transposon e outras) nos íntrons encontra-se abaixo do esperado ( $p < 0,01$ ) segundo uma distribuição uniforme de cópias de TEs no genoma. Analisando em detalhes a distribuição das cópias relativas às classes mais frequentes nos íntrons ortólogos das duas espécies, torna-se evidente a representatividade altamente diminuída em regiões intrônicas adjacentes ao éxon (1 a 100 pb). De forma geral, o padrão emergente expressa uma elevação na frequência padronizada de TEs à medida que a distância em relação ao éxon aumenta, embora seja ainda muito abaixo do esperado. Este padrão parece coerente, uma vez que a maioria das sequências sinalizadoras de splicing localizam-se nas terminações 5' e 3' dos íntrons. Assim sendo, eventos de integração de TEs nas adjacências dos éxons apresentam grande potencial de interrupção do padrão de splicing do gene, o que os torna alvo da pressão evolutiva purificadora. Resultados semelhantes foram encontrados em genomas de mamíferos (humano e camundongo). (2)

**Palavras-chave:** Elementos transponíveis. *Volvox carteri*. *Chlamydomonas reinhardtii*.

#### Referências:

- 1 FESCHOTTE, C. Transposable elements and the evolution of regulatory networks. **Nature Reviews Genetics**, v. 9, n. 5, p. 397-405, May 2008.
- 2 ZHANG, Y.; ROMANISH, M. T.; MAGER, D. L. Distributions of transposable elements reveal hazardous zones in mammalian introns. **PLoS Computational Biology**, v. 7, n. 5, p. 1-13, 2011.
- 3 PROCHNIK, S. E. et al. Genomic analysis of organismal complexity in the multicellular green alga *Volvox carteri*. **Science**, v. 329, n. 5988, p. 223-226, Jul. 2010.

## PG135

### Informação de Fisher como quantificador em mecânica quântica

PIRES, D. P.<sup>1</sup>; PINTO, D. O. S.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

diegopaiva@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A aquisição de informação acerca de um sistema físico pressupõe a realização de medidas e observações que estão condicionadas a incertezas inevitáveis. A tentativa de quantificar estas flutuações tem sido preocupação de uma das áreas da teoria da informação conhecida como Metrologia Quântica. Explorando a relação entre a chamada informação de Fisher e a igualdade de Jarzynski, resultados recentes indicam que a precisão do processo de estimativa de um dado parâmetro tem um limite puramente termodinâmico. (1) De forma similar, podemos caracterizar esta incerteza no protocolo de medida analisando o caráter geométrico da aquisição de informação. Considerando um sistema físico puramente clássico em equilíbrio com um reservatório térmico, a covariância relativa a um particular observável representa uma métrica do espaço de estados termodinâmicos relativo a este sistema. Desta propriedade, podemos calcular o chamado comprimento termodinâmico da curva descrita pela evolução do sistema neste espaço. (2) A covariância e o comprimento termodinâmico dependem diretamente da informação de Fisher que, por sua vez, descreve o grau de distinguibilidade de estados arbitrários e no âmbito quântico pode ser tomada como um eficiente critério na detecção de emaranhamento. (3) Neste contexto, no estágio inicial deste trabalho buscamos generalizar a idéia do comprimento termodinâmico para sistemas quânticos fechados através da conexão entre a matriz de covariância e a informação de Fisher. Até o momento, dispomos de uma representação analítica destas quantidades em termos de derivadas do logaritmo da função de partição relativa a um dado estado térmico. Através destes resultados estudaremos a possibilidade de estabelecer um critério de emaranhamento alternativo que esteja completamente relacionado a função de partição do sistema, verificando ainda seu vínculo a critérios de emaranhamento baseados em relações de incerteza locais. Esperamos estender estes resultados a situações fora do equilíbrio termodinâmico e a sistemas quânticos abertos. Além disso, analisaremos a existência de possíveis testemunhas de emaranhamento e sua relação a criticalidade em transições de fase quânticas de sistemas descritos por certas classes de hamiltonianos a temperatura finita.

**Palavras-chave:** Informação de Fisher. Comprimento termodinâmico. Emaranhamento.

#### Referências:

1 MICADEI, K.; SERRA, R. M.; CÉLERI, L. C. Thermodynamic cost of acquiring information. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1211.0506v2>>. Acesso em: 6 Ago. 2013.

2 CROOKS, G. E. Measuring thermodynamic length. **Physical Review Letters**, v. 99, n. 10, p. 100602-1-100602-4, 2007.

3 LI, N.; LUO, S. Entanglement detection via quantum Fisher information. **Physical Review A**, v. 88,



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

n. 1, p. 014301-1-014301-5, 2013.

## PG136

### Terapia fotodinâmica para o tratamento do melanoma

PIRES, L.<sup>1</sup>; MORIYAMA, L. T.<sup>1</sup>; GRECCO, C.<sup>1</sup>; PRATAVIEIRA, S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

laylabtu@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O melanoma é uma neoplasia maligna agressiva, responsável por cerca de 80 a 85% dos óbitos por tumores cutâneos. A principal abordagem terapêutica é a cirurgia, com a ressecção e esvaziamento linfonodal. Imunoterapia adjuvante, quimioterapia paliativa e radioterapia também são utilizadas, porém, com baixa eficiência e muitos efeitos colaterais. (1) A terapia fotodinâmica (TFD) é uma modalidade terapêutica já utilizada em diversos tumores como de colo uterino, de esôfago, gástrico, de bexiga e pele não melanoma. (2) A técnica é baseada na interação de luz em comprimento de onda específico e fotossensibilizador, na presença do oxigênio molecular, visando morte celular. (2) Por ser um câncer pigmentado, o melanoma não responde bem à terapia fotodinâmica, devido à absorção da luz na superfície tecidual, inviabilizando sua erradicação. Estudos envolvendo microscopia óptica utilizam soluções clareadoras à base de glicerol para aumentar a penetração da luz e obter informações de camada mais profundas da pele. Neste estudo pretende-se modificar as características ópticas do melanoma utilizando clareadores ópticos para aumentar a eficiência da terapia fotodinâmica. Para isso,  $10^7$  células de melanoma murino (B16F10) foram injetadas por via intradérmica na região dos flancos de camundongos nude. Foi realizada cinética de três fotossensibilizadores administrados por via endovenosa em camundongos na dose de 1,5mg/kg para o Photogem e 1,0mg/kg para a clorina e6 e Photodithazine. O monitoramento do composto na lesão foi realizado via espectroscopia de fluorescência. A caracterização óptica da lesão experimental foi realizada por meio de medidas de refletância em função do raio na superfície da lesão para determinar o coeficiente de atenuação total do tumor. O tecido foi avaliado antes e após a aplicação das soluções clareadoras. Para verificar possíveis alterações a nível celular e morfológico realizou-se medidas de tempo de vida médio de fluorescência e histopatologia. Nos ensaios de terapia fotodinâmica, os fotossensibilizadores foram injetados por via endovenosa e após o acúmulo do composto na lesão, aplicou-se a solução clareadora e iniciou a irradiação. O efeito da TFD foi avaliado por microscopia confocal, microscopia por absorção de dois fótons e histopatologia. O estudo de cinética mostrou que as clorinas possuem maior afinidade pelo tumor e foram detectadas uma hora após a administração. Esses resultados estão de acordo com estudos *in vitro* em que foi observada uma distribuição homogênea das clorinas quando comparadas às porfirinas. Os ensaios de caracterização óptica apresentaram grande heterogeneidade tecidual, característica de tumores. Após a aplicação do clareador óptico obteve-se a redução do coeficiente de atenuação total em aproximadamente 92%. Além disso, não foi observado alteração no tempo de vida médio de fluorescência, indicando integridade nos processos celulares, envolvendo NADH e FAD. Os ensaios de terapia fotodinâmica apresentaram redução significativa da lesão, entretanto, a dependência da fluência e da irradiância ainda estão sendo investigadas. Os resultados, obtidos até o momento, indicam que os clareadores ópticos são capazes de alterar as características ópticas do melanoma de modo a reduzir o coeficiente de atenuação total do tecido permitindo uma maior penetração da luz no tecido, possibilitando o tratamento do melanoma com TFD.

**Palavras-chave:** Melanoma. Terapia fotodinâmica. Clareadores ópticos.

**Referências:**

- 1 GARBE, C.; EIGENTLER, T. K. Diagnosis and treatment of cutaneous melanoma: state of the art 2006. **Melanoma Research**, v. 17, n. 2, p. 117-27, 2007.
- 2 DOLMANS, D. E.; FUKUMURA, D.; JAIN, R. K. . Photodynamic therapy for cancer. **Nature Reviews: cancer**, v. 3, n. 5, p. 380-387, 2003.

## PG137

### Desenvolvimento de API e IDE para Ressonância Magnética

PIZETTA, D. C.<sup>1</sup>; SILVA, D. M. D. D. da<sup>1</sup>; LOURENÇO, G. V.<sup>1</sup>; FREIRE, G.<sup>1</sup>; COELHO, F. B.<sup>1</sup>; MARTINS, M. J.<sup>1</sup>; VIDOTO, E. G.<sup>1</sup>; TANNUS, A.<sup>1</sup>

daniel.pizetta@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

Neste trabalho serão discutidas as novas ferramentas para a construção de um Espectrômetro de Ressonância Magnética totalmente digital, em sua forma mais complexa, um Tomógrafo Digital de RM (TDRM-Projeto ToRM-15). A motivação para este trabalho é devida à questão desta tecnologia no Brasil ser tão pouco desenvolvida, sendo considerada de alto valor agregado. (1) Além disso, os softwares existentes em equipamentos atualmente comercializados possuem recursos limitados na questão de desenvolvimento de novas sequências de pulsos e interação com simuladores. Em particular trataremos o desenvolvimento de uma API (Application Program Interface) que constitui a representação em software do equipamento e suas funcionalidades e de um IDE (Integrated Development Environment) para criação e gerenciamento das sequências de pulsos, protocolos e do próprio sistema físico de forma funcional, amigável e independente de softwares e hardwares comerciais. Com o projeto espera-se conseguir melhoria na eficiência, qualidade e flexibilidade comparadas aos softwares atuais que exercem tais funções. Tal flexibilidade não é fornecida pelos TRM já existentes devido a sua limitação ao conjunto de sequências pré-existentes ou à extrema complicação na configuração de novas sequências. (2) A linguagem de programação base Python foi adotada por esta ter uma linha de aprendizado rápido, ser simples e com interface para várias outras linguagens como C++ e CUDA. Todos os componentes do software foram gerados utilizando-se bibliotecas e frameworks de código aberto. A modelagem do sistema foi realizada com base em UML (Unified Modelling Language), incluindo também conceitos de HCI (Human-Computer Interaction) como questionários e entrevistas com especialistas para a especificação das funcionalidades. Toda a programação se baseia em Orientação a Objetos que reflete uma maneira fácil de representar o sistema em questão e que é altamente legível, mesmo por inexperientes na área. O IDE possui funcionalidades como um editor de parâmetros, um editor gráfico de sequências, um editor textual e ferramentas que auxiliam os testes e validações. A criação destas ferramentas também permitiu a clara divisão do processo de desenvolvimento (no IDE) e execução das sequências (na Console de Controle). Esta forma de descrição de sequências permite também a integração fácil com simuladores como, por exemplo, os simuladores GAMMA para espectroscopia e JEMRIS para imagens. Para a validação do sistema foi montada uma sequência de pulsos conhecida como CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill), que ainda neste momento, foi produzida por edição textual através do IDE, que realizou também sua validação através dos atributos dos parâmetros e através dos scripts. Após ser executada pela Console, que compila e envia ao Espectrômetro Digital para a execução, os sinais de RF e gate foram adquiridos na saída do Espectrômetro, resultando em um trem de ecos. O sinal adquirido de um phantom de PVC preenchido com uma solução de CuSO<sub>4</sub> com pequeno valor de T<sub>2</sub> foi utilizado como teste. Os resultados já mostram sua capacidade de gerar sequências de pulsos complexas para IRM. Os próximos passos serão integrar os simuladores e gerar sequências para os softwares comerciais para compará-los.

**Palavras-chave:** Imagens por Ressonância Magnética. Sequências de pulsos. Integrated development environment.

#### **Referências:**

1 ANDRADE, E.I.G. et al. Análise da evolução do conhecimento e da difusão e incorporação da tecnologia de ressonância magnética no Brasil. In: BRASIL.Ministerio da Saude.**Avaliação de tecnologias em saúde**:seleção de estudos apoiados pelo DECIT. Brasília:2011. p.23.

2 DEBBINS,J. et al. Novel software architecture for rapid development of magnetic resonance applications. **Concepts in Magnetic Resonance**, v.15, n.3, p. 216-237, October 2002.

## PG138

### Utilização de técnicas de Imagens por ressonância magnética para o estudo de meios porosos

POLLI, R. S.<sup>1</sup>; OLIVEIRA-SILVA, R.<sup>1</sup>; SOUZA, A. A.<sup>2</sup>; VIDOTO, E. L. G.<sup>1</sup>; AMORIM, A. D. F.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

roberson@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Schlumberger Brazil Research and Geoengineering Center - UFRJ

A utilização de imagens por ressonância magnética (IRM) é bem conhecida em medicina diagnóstica, porém têm sido muito empregada no momento na área de ciência dos materiais. Os mesmos princípios podem ser aplicados também ao estudo de meios porosos saturados por fluidos, incluindo rochas reservatório de petróleo. Contudo, a própria estrutura porosa das rochas e suas características físico-químicas causam vários efeitos, a princípio destrutivos, tal como a suscetibilidade magnética e presença de impurezas paramagnéticas, que impedem a obtenção de imagens de alta resolução. Assim, foram propostas novas técnicas de IRM, visando minimizar ou explorar os efeitos acima citados, além de obter tanto informações sobre a dinâmica dos fluidos (como mapas de velocidade e difusão), quanto informações mais próximas das obtidas por ferramentas de perfilagem de poços (como permeabilidade, porosidade e distribuição de tamanhos de poros). Uma vez que o nosso grupo já possui histórico bastante relevante em IRM (1), neste projeto visamos retomar esta área de pesquisa, agora aplicada ao estudo de rochas reservatório de petróleo, entre outros meios porosos. Para tanto, este projeto envolve as seguintes etapas: desenvolvimento do equipamento de RMN e acessórios para a geração de imagens e implementação de sequências de pulsos de rf e gradientes de campo magnético específicas para os meios porosos, baseadas em uma técnica de IRM denominada SPRITE. (2) No momento, o equipamento de RMN para a realização dos experimentos acima citados está praticamente montado, podendo ser utilizado, não apenas para a geração de imagens, como também para o estudo da penetração de líquidos através dos meios porosos com o emprego dos gradientes de campo magnético. Entre os projetos que estão sendo desenvolvidos, destacamos o estudo da geração de wormholes em rochas reservatório de petróleo e de dinâmica de fluidos em meios porosos. No caso dos wormholes, temos uma parceria com a empresa Schlumberger. Como no início desta colaboração nossa infraestrutura não estava plenamente montada, utilizamos o sistema do CIERMag (Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética) que consiste de um magneto supercondutor de 2 T e um console Bruker Avance AVIII. As imagens foram obtidas através de uma bobina de rf do tipo cela cruzada. (3) Através de técnicas de ecos de gradiente, tal como a FLASH, foi possível visualizar os wormholes, bem como estimar seus diâmetros médio (1 mm). Como perspectiva, realizaremos estudos nos quais induziremos fluxo de fluidos através das amostras. Desta forma, poderemos quantificar a permeabilidade do meio poroso com a utilização integrada de técnicas de RMN de imagens, relaxometria e difusometria. Ainda como perspectiva, o aluno responsável pelo projeto fará um estágio no grupo de IRM da Universidade de New Brunswick, com o professor Bruce Balcon (criador da técnica SPRITE), o que virá a consolidar o conhecimento do aluno no tema específico de IRM em meios



porosos.

**Palavras-chave:** IRM. Meios porosos. Fluxo.

#### **Referências:**

- 1 TANNUS, A. **Desenvolvimento da tecnologia de tomografia por ressonância magnética nuclear - TORM**. 1987. 227 p. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1987.
- 2 PAPOTI, D. **Transdutores de RF para experimentos de imagens em pequenos animais**. 2006. 144 p. Dissertação (Mestrado em Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.
- 3 BALCOM, B. J.; MACGREGOR, R. P.; BEYEA, S. D.; GREEN, D. P.; ARMSTRONG, R. L.; BREMNER, T. W. A single point ramped imaging with T1 enhancement (SPRITE). **Journal of Magnetic Resonance A**, v. 123, n. 1, p. 131-134, 1996.

## PG139

### Composition of ultra high energy cosmic rays

PRADO, R. R.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

raul.prado@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The cosmic rays study has been very important during the last 100 years, not only as a source of astrophysical phenomena information, but also as a natural laboratory to study fundamental interactions between elementary particles. The experiments developed to study astroparticle physics differ greatly from conventional astronomical experiments because they measure the shower of secondary particle generated from the collision of primary particle with atmosphere, thus, measures are taken indirectly. Over the years, due to the evolution of measurement techniques became possible to detect events started by primary particle with higher and higher energy. The Pierre Auger Observatory (1), located in Malargue, Argentina, is a representative of the younger generation of cosmic rays experiments and, through a hybrid system consisting of Cherenkov tanks as surface detectors and fluorescence telescopes, is able to measure showers generated by primary particles with energy above  $10^{18}eV$  (4 orders above high limit measured by Large Hadrons Collider, LHC). The three bigger unresolved issues about ultra high energy cosmic rays are: composition (2), astrophysical sources (3) and energy spectrum. This study is directly related with composition problem and aims to infer, using shower parameters measured by Pierre Auger observatory, the type of primary particle (for instance, proton, carbon nuclei and iron nuclei). The main problem in this study is the large natural fluctuation of composition sensitive parameters, due to the probabilistic character of elementary interactions which command the first collision between primary particle and atoms of the atmosphere. We address this question by two different ways: a) unfolding methods applied in elongation rate data, and b) supervised multivariate analysis using air shower parameters. First one is an alternative approach to the traditional elongation rate analysis based on  $X_{max}$  parameter. Unfolding methods has been intensively used in high energy physics data analysis because they allow to extract the detector effect from data, without using cuts. In this context, it is possible to increase the number of events available and thereafter decrease the statistical uncertainty in the final analysis. Second approach is based on learning algorithms, like linear discriminant analysis and neural networks, applied to air shower profile parameters aiming to separate events according to their primary composition. In this study, we will discuss the quality and the consistency of both techniques cited above, and we will show physical results from these analysis, in the context of composition of high energy cosmic rays.

**Keywords:** High energy cosmic rays. Data analysis. Composition.

#### Referências:

1 ABRAHAM J. et al. Properties and performance of the prototype instrument for the Pierre Auger Observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: accelerators, spectrometers, detectors and associated equipment**, v. 523, n. 1, p. 50-95, 2004.

2 KAMPERT, K. H.; UNGER, M. Measurements of the cosmic ray composition with air shower experiments. **Astroparticle Physics**, v. 35, n. 10, p. 660-678, 2012.

3 ABRAHAM J. et al. Correlation of the highest-energy cosmic rays with nearby extragalactic objects. **Science**, v. 318, n. 5852, p. 938-943, 2007.

## PG140

# Microscopia óptica não-linear para imagens de sistemas biológicos

PRATAVIEIRA, S.<sup>1</sup>; GRECCO, C.<sup>1</sup>; PIRES, L.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

sp\_prata@hotmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O diagnóstico preciso das características morfológicas e metabólicas de um tecido e/ou órgão com a finalidade de identificar alterações patológicas, ou mesmo, a avaliação de um determinado tratamento, é de grande importância nas áreas de biologia e medicina. Dentre as modalidades diagnósticas, o uso de técnicas ópticas na aquisição de imagens de tecidos biológicos apresenta uma excelente alternativa para a visualização de células, com resposta imediata e sem a necessidade de remoção da amostra tecidual. A fluorescência devido à absorção de dois fótons é um exemplo de técnica óptica não linear para a realização, *in vivo*, de imagens com resolução espacial celular e profundidade de investigação superior à técnica de microscopia confocal convencional. (1) Neste estudo, apresenta-se o desenvolvimento de um microscópio óptico não linear customizado, para a aquisição de imagens devido à absorção de dois fótons em amostras *in vitro*, *ex vivo* e *in vivo*. O microscópio foi calibrado, caracterizado e foram realizadas imagens de fluorescência e de geração de segundo harmônico de tecidos biológicos a partir de biópsias. Através destas amostras, foi possível a observação da morfologia celular dos diferentes tecidos com resolução celular.

**Palavras-chave:** Microscópio óptico. Fluorescência. Óptica não linear.

### Referências:

1 MASTERS, B. R.; SO, P. T. C. **Handbook of biomedical nonlinear optical microscopy**. New York: Oxford University Press, 2008.

## PG141

# Processamento digital de sinais de ressonância magnética nuclear

QUEIROZ, G. E. T.<sup>1</sup>; GUIDO, R. C.<sup>1</sup>

getqueiroz@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As técnicas de processamento digital de sinais têm representado importante papel em avanços nas mais diversas áreas do conhecimento científico como, engenharia, física, biologia, medicina, dentre outras. As práticas envolvendo processamento de sinais digitais, seja análise, extração ou manipulação de informações, têm sido bastante beneficiadas com a rápida evolução do poder computacional e o fácil acesso a esse recurso, de modo que, frente aos resultados positivos a investigação de uma abordagem envolvendo processamento digital de sinais na solução de determinados problemas é bastante promissora. Esta investigação se justifica principalmente nos casos em que os métodos empregados atualmente apresentam custo computacional elevado ou mesmo resultados pouco satisfatórias, como ocorre na determinação da distribuição dos tempos de relaxação longitudinal ( $T_1$ ) e transversal ( $T_2$ ) em sinais de magnetização obtidos em experimentos de ressonância magnética nuclear (RMN) envolvendo meios porosos. Esses sinais são formados por múltiplas componentes de decaimento exponencial e descritos, em uma forma geral, por meio da seguinte equação:  $m(y) = \int g(x)k(y, x)dx$  (1), conhecida como equação integral de Fredholm do primeiro tipo, onde normalmente  $m(y)$  e  $k(y, x)$  são conhecidas *a priori*. A forma discreta da equação anterior para um sinal de decaimento de uma determinada distribuição de valores  $T_2$  pode ser descrita por  $m(\tau) = \sum_{i=1}^n g(T_{2i})e^{(\tau/T_{2i})}$ , desta forma, para obter a distribuição dos tempos de relaxação  $g(T_2)$  através de  $m(\tau)$  é necessário realizar a inversão da equação discretizada. Esse procedimento pertence a uma classe de problemas que aparece com bastante frequência na física (2), conhecida como problemas inversos mal-postos. Neste trabalho, objetivou-se obter as distribuições de tempos de relaxação através de três diferentes abordagens envolvendo métodos de processamento digital de sinais: 1) três diferentes arquiteturas de redes neurais artificiais (RNA): perceptron multi camadas (MLP), redes de função de base radial (RBF) e redes recorrentes de Hopfield, 2) uma nova abordagem de filtragem adaptativa regularizada envolvendo restrições de não-negatividade, 3) decomposição em valores singulares (SVD) com regularização de Tikhonov, método mais utilizado na solução de problemas inversos mal-postos.

**Palavras-chave:** Processamento digital de sinais. Redes neurais artificiais. Ressonância magnética nuclear.

### Referências:

- 1 COATES, G. R.; XIAO, L.; PRAMMER, M. G. **NMR logging**: principles and applications. Texas: Gulf Publishing Company, 1999. 234p.
- 2 HANSEN, P. C. **Rank-deficient and discrete ill-posed problems**: numerical aspects of linear



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

inversion. Philadelphia: SIAM, 1998. 263p.

## PG142

### Estudos estruturais e funcionais de uma endoglucanase pertencente a família das glicosil-hidrolases 45

GODOY, A.<sup>1</sup>; CAMILO, C. M.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>; RAMIA, M.<sup>1</sup>

marinapramia@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O fungo basidiomiceto (*Phanerochaete chrysosporium*) produz multi-enzimas capazes de hidrolisar as fibras de celulose eficientemente. Essas enzimas chamadas celulasas tem sido objeto de intensos estudos recentemente devido a habilidade de converter a biomassa celulósica em açúcares solúveis. A celulose é o biopolímero mais abundante do planeta, portanto a produção de etanol a partir dela é hoje a opção mais atrativa para produção de biocombustíveis. Pouco se sabe das celulasas produzidas pelo fungo (*P. chrysosporium*), especialmente sobre as enzimas da família 45. (1) Neste trabalho elucidamos a estrutura da enzima endoglucanase (Cel45A) em sua forma livre e em complexo com a celobiose a 1.4 Å de resolução, além dos ensaios funcionais. Essa enzima pertencente a família 45 mostrou-se estruturalmente um beta-barril de seis folhas assim como já foi encontrado em outras endoglucanases dessa família. Como o esperado, o resíduo Asp 121 é conservado e age como o doador de próton. Entretanto o resíduo acceptor no mecanismo de ação ácido-base dessa enzima é modificado, sugerindo que seja outro o resíduo catalítico. Além disso, essa enzima possui uma estabilidade térmica considerável, o que a torna interessante do ponto de vista industrial.

**Palavras-chave:** Glicosil hidrolase. Estudos funcionais. Raio-x.

#### Referências:

1 IGARASHI, K. et al. Characterization of endoglucanase belonging to new subfamily of glycoside hydrolase family 45 from the basidiomycete *Phanerochaete chrysosporium*. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 74, n. 18, p. 5628-5634, 2008.

## PG143

### **Avaliação da técnica de espectroscopia de plasma induzido por laser no diagnóstico de doenças em citrus: Greening**

RANULFI, A. C.<sup>1</sup>; SILVA da, J. T. B.<sup>2</sup>; RABELLO, G. C.<sup>3</sup>; SILVA da, D. C.<sup>3</sup>; VILLAS BOAS, P. R.<sup>4</sup>; MILORI, D. M. B. P.<sup>4</sup>

aniranulfi@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Departamento de Matemática - UFSCAR

<sup>3</sup>Centro Universitário Central Paulista - UNICEP

<sup>4</sup>EMBRAPA - CNPDIA

O agronegócio é fundamental para a economia brasileira, representa cerca de um terço do nosso PIB e tem dado grande contribuição às exportações de commodities e produtos agroindustriais. A laranja faz com que o país torne-se o líder de produção no mundo, detendo 25% desta. Já em se tratando do suco de laranja, o Brasil detém mais da metade da produção e exporta 98% desta. A força do suco de laranja brasileiro no comércio internacional é motivo de orgulho e tem sabor e respeito único para o Brasil no mundo(1). Porém, um dos principais fatores atuais que restringem os lucros e a expansão da citricultura é, em especial, que as plantações de frutas cítricas podem ser acometidas por uma variedade de doenças e pragas. O monitoramento destas é fundamental para evitar danos aos frutos e a necessidade de erradicação de plantações inteiras. Atualmente, o controle do Greening (ou HLB - *Huanglongbing*) é realizado apenas por inspeção visual e avaliações por PCR de poucas árvores somente para confirmar a presença do patógeno no campo. Desta forma, a presente proposta tem como objetivo explorar o uso da técnica fotônica de Espectroscopia de Emissão de Plasma Induzido por Laser - LIBS (acrônimo do inglês *Laser Induced Breakdown Spectroscopy*) como uma alternativa às inspeções visuais e ao PCR utilizados atualmente como referência nas formas de diagnóstico. LIBS é uma técnica espectroanalítica que utiliza plasma gerado por pulsos de laser de alta energia para preparar a amostra e excitar os analitos em um único passo. Assim, é formado um plasma com emissões multi elementares e estas, por sua vez, são resolvidas através de um espectrômetro que nos fornece como resultado as linhas de emissão características das espécies excitadas(2). Desta forma, buscou-se avaliar inicialmente o perfil espectral de cada uma das classes em estudo (Saudável, HLB-Sintomática e HLB-Assintomática), e assim investigar a possibilidade de diagnóstico rápido através desta técnica. Um conjunto de 195 folhas foi analisado, sendo 65 de cada classe. Foi obtido 10 espectros por amostra. Estes passaram por um pré-processamento em que foram normalizados por sua área a fim de enfatizar as diferenças entre os espectros e diminuir a influência da radiação de fundo, e em seguida foi feita a média dos mesmos para cada folha. O conjunto foi dividido de forma randômica em duas partes (9/10 e 1/10 do total), onde a primeira foi utilizada para gerar um modelo de calibração empregando o método de regressão linear parcial. Como dados de entrada, utilizou-se a faixa espectral de 190 a 900nm, e a taxa de acerto para o modelo foi de 85%. A segunda parte do conjunto foi utilizada para a validação do modelo, e nesta etapa o acerto foi de 80%. Desta



forma, é possível demonstrar que a técnica LIBS tem alto potencial no diagnóstico do Greening, de forma rápida, barata, sem a geração de resíduos, além de possibilitar o diagnóstico precoce se comparado com os métodos de referência. E ainda, é uma técnica que permite a portabilidade, possibilitando medidas em campo.

**Palavras-chave:** Espectroscopia de plasma induzido por laser. Greening. Diagnóstico de doenças em citros.

#### **Referências:**

1 NEVES, M. F.; TROMBIN, V. G.; MILAN, P.; LOPES, F. F.; CRESSONI, F.; KALAKI, R. **O retrato da citricultura brasileira**. Ribeirão Preto: Markestrat, 2010.

2 PEREIRA, F. M. V.; MILORI, D. M. B. P.; VENÂNCIO, A. L.; RUSSO, M. S. T.; MARTINS, P. K.; FREITAS-ÁSTUA, J. Evaluation of the effects of *Candidatus Liberibacter asiaticus* on inoculated citrus plants using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and chemometrics tools. **Talanta**, v. 83, n. 2, p. 351-356, 2010.

## PG144

### Properties of $Pt_n$ $n = 1 - 6$ on Graphene

REGO, C. R. C.<sup>1</sup>; TERESHCHUK, P.<sup>2</sup>; OLIVEIRA, L. N.<sup>1</sup>; DA SILVA, J. L. F.<sup>2</sup>

celsoricardorego@bol.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Transition-metal (TM) nanoparticles (NP) supported on graphene have been considered for a wide range of technological applications, which includes magnetic storage, catalysis, electrochemistry, and etc, due to the possibilities to combine the physical and chemical properties of TM nanoparticles with the unique support properties of graphene. However, experimental studies have found strong evidences of sintering at high temperature, which, therefore, creates difficulties for technological applications. To obtain a better understanding of those problems, a deep understanding of the interaction mechanism of TM NP with graphene sheets is required. (1) In this work, we will report a first-principles investigation of the adsorption properties of small platinum clusters  $Pt_n$  ( $n = 1 - 5$ ) on graphene using *Ab-initio* Density Functional Theory (DFT) within the generalized gradient approximation formulated by Perdew, Burke, and Ernzerhof (DFT+PBE) (2) as implemented in VASP. To improve the description of the nonlocal long range dispersion interactions, we employed a van der Waals correction using the Tkatchenko-Scheffler formulation (PBE+TS). (3) Graphene sheet was modeled using a periodical unit cell, 6x6, of 72 carbon atoms, with a vacuum distance of 16 Å between image layers. Our calculated C-C bond of a graphene layer is 2.466 Å, which is in a good agreement with experimental results, i.e. 2.462 Å (3). We found that a Pt atom preferentially adsorbs on the bridge site with a Pt-C bond length of 2.09 Å, while for higher energy structures, where Pt atom is located on top and hollow sites of graphene, the bond lengths are 2.02 Å and 2.39 Å, respectively, with a zero magnetic moments ( $M$ ) for all cases. We obtained that Pt clusters ( $n=2, 3$  and  $4$ ) are planar and oriented almost upright in relation to graphene sheet with  $M = 1.78, 0$  and  $1.77 \mu_B$  in the  $Pt_2 - C$ ,  $Pt_3 - C$  and  $Pt_4 - C$  configurations, respectively. Our initial results employing the PBE+TS functional yields the same C-C and Pt-C bonds lengths, which indicates a minor role of vdW correction for the adsorption of a single Pt atom on graphene. Work in progress for large clusters.

**Palavras-chave:** DFT. Graphene  $Pt_n$ . van der Waals.

#### Referências:

1 TERESHCHUK, P. DA SILVA, J. L. F. . Encapsulation of small magnetic clusters in fullerene cages: A density functional theory investigation within van der Waals corrections. **Physical Review B** , v.85, p.195461, 2012.doi: 10.1103/PhysRevB.85.195461.

2 PERDEW, J. P. ; BURKE, K.; ENZERHOF, M. . Generalized gradient approximation made simple. **Physica Review Letters** , v.77, n. 18, p.3865- 3868, 1996.

3 BUCKO,T.; LEBEGUE, S.; HAFNER, J.; ANGYAN, J. G. Tkatchenko-Scheffler van der Waals correction method with and without self-consistent screening applied to solids. **Physical Review B** ,v.87, n.6, p.064110, 2013.

## PG145

### Aplicação da luz intensa pulsada em terapia fotodinâmica

REQUENA, M. B.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; MENEZES, P. F. C.<sup>1</sup>

michelle@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica (TFD) caracteriza-se por um conjunto de processos físicos, químicos e biológicos que ocorre após a administração de compostos fotossensibilizantes que ficam retidos exclusivamente nos tecidos neoplásicos, seguido pela irradiação com luz visível. Logo em seguida ocorrem mecanismos de transferência de energia entre o fotossensibilizador (FS) e o oxigênio molecular presente nos tecidos gerando espécies reativas de oxigênio capazes de levar o tecido tumoral a morte. A TFD com o ácido 5-aminolevulínico (ALA), como precursor da formação de protoporfirina IX (PpIX), vem sendo utilizada no tratamento e diagnóstico de diferentes tipos de tumores de pele e está ocupando um espaço cada vez maior na dermatologia no tratamento de outras doenças de pele. Entretanto, existem vários fatores que influenciam no aumento da penetração do ALA na pele, como: características físico químicas do ALA e das emulsões em que está presente, diferenças no sistema de iluminação e dosimetria de luz adequada, bem como diferenças relativas às características da superfície tumoral. Este trabalho tem por objetivo otimizar a TFD utilizando a luz pulsada como sistema de iluminação. A aplicação da luz pulsada em TFD leva a diferentes tipos de vantagens, visto que diminui o tempo de tratamento e consequentemente a dor durante o procedimento. Além disso a TFD com luz pulsada diminui a necessidade de fidelização a um só tipo de fotossensibilizador já que emite luz em diferentes comprimentos de onda (do violeta ao infravermelho) dependendo do tipo de filtro utilizado. Outra grande aposta é a possibilidade de com LIP conseguir fotoativar um maior número de bandas dos fotossensibilizadores, gerando, portanto, uma maior quantidade de oxigênio singleto em um tempo relativamente curto evitando assim diminuição da oxigenação do tecido decorrente do tempo elevado de iluminação. Neste contexto a TFD com LIP apresenta viabilidade técnica e comercial para ser implementada em TFD. Raramente têm sido utilizadas lâmpadas na TFD, dada à baixa intensidade e a necessidade do uso de um sistema de dissipação para o calor gerado. Porém, trabalhos mostram que o uso de luz intensa pulsada provinda de lâmpadas é eficiente na área dermatológica de tratamento estético na remoção de pelos e tratamento de lesões vasculares (1) e fotorejuvenescimento da pele (2) devido ao dano fotoquímico e térmico seletivo ao alvo pela seleção de comprimento de onda, intensidade, duração e intervalo do pulso. Outro estudo revela que a utilização da LIP como fonte de luz em TFD no tratamento de acne (3) teve resultados promissores. O objetivo deste trabalho de mestrado é confirmar a hipótese de que é possível realizar a TFD com luz pulsada.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Luz intensa pulsada. Fotossensibilizadores.

#### Referências:

1 ALSTER, T. S.; TANZI, E. L. . Effect of a novel low-energy pulsed-light device for home-use hair removal. **Dermatologic Surgery**, v. 35, n. 3, p. 483-489, 2009.

2 HEDELUND, L.; DUE, E.; BJERRING, P.; WULF, H. C.; HAEDERSDAL, M. Skin rejuvenation using intense pulsed light: a randomized controlled split-face trial with blinded response evaluation. **Archives of Dermatology**, v. 142, n. 8, p. 985-990, 2006.

3 SHAABAN, D.; ABDEL-SAMAD, Z.; EL-KHALAWANY, M. Photodynamic therapy with intralesional 5-aminolevulinic acid and intense pulsed light versus intense pulsed light alone in the treatment of acne vulgaris: a comparative study. **Dermatologic Therapy**, v. 25, n. 1, p. 86-91, 2012.

## PG146

### Fabrication of thin films using gold nanorods and polyamidoamine dendrimers

RIBOVSKI, L.<sup>1</sup>; MARANGONI, V. S.<sup>1</sup>; SANTOS, F. A.<sup>1</sup>; JANEGITZ, B. C.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTTO, V.<sup>1</sup>

laisribovski@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Sensors based on nanoparticles-modified electrodes exhibit interesting features such as the high effective area, enhanced mass transport, and control over electrode microenvironment, which can increase the sensor's selectivity and sensibility. (1) Gold nanoparticles have been extensively used for electrodes modification due to their unique size-dependent properties that differ from the bulk material. Here, we propose a new modified electrode based on immobilization of gold nanorods (AuNRs) and polyamidoamine generation 4 (PAMAM-G4) (2) obtained by casting on glassy carbon electrodes. UV-Vis spectroscopy confirmed the stability of the AuNR-PAMAM films that did not show aggregates/agglomerates. The electroactive areas of the AuNRs-PAMAM/GCE and the bare GCE electrodes were calculated at 1.1 cm<sup>2</sup> and 0.7 cm<sup>2</sup> (n=5), respectively, revealing that the AuNRs-PAMAM increased the electroactive surface area compared with the bare GCE electrodes. As an additional advantage, the proposed electrodes are simple to prepare and could be applied in the immobilization of enzymes for sensing and biosensing.

**Keywords:** Gold nanorods. Electrochemistry characterization. Modified electrodes.

#### Referências:

1 JANEGITZ, B.C.; MEDEIROS, R.A.; R.C. ROCHA FILHO, R.; FATIBELLO FILHO, C. O. Direct electrochemistry of tyrosinase and biosensing for phenol based on gold nanoparticles electrodeposited on a boron-doped diamond electrode. **Diamond and Related Materials**, v. 25, p. 128-133, 2012.doi: 10.1016/j.diamond.2012.02.023 .

2 FORTI, J. C.; AQUINO NETO, S.; ZUCOLOTTTO, V.; CIANCAGLINI, P.; ANDRADE, A. R. Development of novel bioanodes for ethanol biofuel cell using PAMAM dendrimers as matrix for enzyme immobilization. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 26, n. 5, p. 2675-2679, Jan. 2011.

## PG147

### Unveiling the bactericidal molecular mechanism of conjugated cationic polyelectrolyte on a biomimetic membrane (Langmuir Film) by sum-frequency generation spectroscopy

RIMOLI, C. V.<sup>1</sup>; WHITTEN, D.<sup>2</sup>; MIRANDA, P. B.<sup>1</sup>

cvrimoli@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Center for Biomedical Engineering and Department of Chemical & Nuclear Engineering - University of New Mexico

The increasing microorganism resistance to antibiotics is a matter of global concern. In this context, it is evident that research on new antimicrobial molecules or strategies is crucial. Among these, cationic Conjugated Polyelectrolytes (CPEs) are promising candidates to wide-spectrum bactericidal agents. There are many advantages of CPEs when compared to other small biocides: increased lifetimes, potency and specificity and lower residual toxicity (1). In addition, CPEs are amphipathic (they self-assemble into nanostructures in liquids), can be functionalized and some CPEs have good optical properties for photodynamical action (2) at potential for technological applications such as solid substrate coatings (medical devices, knobs, etc) and colloidal bactericidal action in liquid mixtures. Nevertheless, the details of the CPEs' action mechanism at the bacterial plasmatic membranes remain unknown at the molecular level. This work aims at unveiling this biocidal mechanism by performing an Interface-Specific Nonlinear Vibrational Spectroscopy using Sum-Frequency Generation (SFG Spectroscopy) on a biomimetic plasmatic membrane (Langmuir film). SFG Spectroscopy (3) is perfect for this type of analysis, because it collects only the vibrational spectrum of the interfacial molecules (CPEs and Langmuir film). No signal from the bulk molecules in centrosymmetric media (CPEs and water in the subphase) is detected by this technique. It may also provide information on the conformation of membrane lipids and on their interaction with CPE's adsorbed from solution.

**Keywords:** Bactericidal mechanism. Conjugated polyelectrolytes. SFG spectroscopy.

#### Referências:

- 1 KENAWY, E.-R.; WORLEY, S. D.; BROUGHTON, R. The chemistry and applications of antimicrobial polymers: a state-of-the-art review. **Biomacromolecules**, v. 8, n. 5, p. 1359-1384, 2007.
- 2 CORBITT, T. S.; DING, L.; JI, E.; ISTA, L.K.; OGAWA, K.; LOPEZ, G. P.; SCHANZE, K. S.; WHITTEN, D. G. . Light and dark biocidal activity of cationic poly(arylene ethynylene)conjugated polyelectrolytes. **Photochemical & Photobiological Sciences**, v. 8, n. 7, p. 998-1005, 2009.
- 3 ZHUANG, X.; MIRANDA, P. B.; KIM, D.; SHEN, Y. R. Mapping molecular orientation and conformation at interfaces by surface nonlinear optics. **Physical Review. B**, condensed matter and



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

materials physics, v. 59, n. 19, p. 12632-12640, 1999.



## PG148

### Compósitos laminados e nanocompósitos magnetoelétricos

RODRIGUES, J. E. F.<sup>1</sup>; HERNANDES, A. C.<sup>1</sup>

rodrigues.joaaoelias@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

No presente projeto, pretendemos avaliar as potencialidades de compósitos laminados como dispositivos magnetoelétricos. Tais dispositivos são governados por um acoplamento entre uma parte piezoelétrica e outra magnetoestrictiva, possibilitando, dessa forma, um controle das propriedades magnéticas (elétricas) do material pela aplicação de um campo elétrico (magnético). Uma segunda forma de avaliar a ocorrência do acoplamento magnetoelétrico dar-se-á pela síntese de nanocompósitos, no qual ambos os materiais (partes) estão homogeneamente distribuídos numa única matriz. Pretendemos, portanto, avaliar o rendimento de ambas as conformações (laminar e nanocompósitos), observando os valores dos coeficientes de acoplamento  $\alpha_{ij}^{E-B}$ . Há um forte apelo por esses dispositivos na indústria moderna de memórias RAM, no qual se almeja uma combinação das operações de escrita elétrica ultrarrápida com operações de leitura magnética não destrutiva. (1) Do ponto de vista físico, há um profícuo ramo científico a ser explorado no entendimento correto da forma como o acoplamento é efetuado em tais sistemas. (2)

**Palavras-chave:** Magnetoelétricos. (Nano)compósitos. Multiferróicos.

#### Referências:

1 SCOTT, J. F. Applications of magnetoelectrics. **Journal of Materials Chemistry**, v. 22, n. 11, p. 4567-4574, 2012.

2 SPALDIN, N. A.; CHEONG, S. W.; RAMESH, R. Multiferroics: past, present and future. **Physics Today**, v. 63, n. 10, p. 38, 2010. doi:10.1063/1.3502547.

## PG149

### Structural studies of the old yellow enzyme from *Trypanosoma cruzi*

RODRIGUES, N. C.<sup>1</sup>; MURAKAMI, M. T.<sup>2</sup>; HONORATO, R. V.<sup>2</sup>; GAVA, L. M.<sup>3</sup>; CANDURI, F.<sup>4</sup>; BARBOSA, L. R. S.<sup>5</sup>; OLIVA, G.<sup>1</sup>; BORGES, J. C.<sup>4</sup>

nathdecampos@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Laboratório Nacional de Biociências - CNPEM

<sup>3</sup>Departamento de Genética e Evolução - UFSCar

<sup>4</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

<sup>5</sup>Instituto de Física - USP

Chagas disease is caused by the protozoan *Trypanosoma cruzi* and represents a still serious public health problem in developing countries throughout South and Central America, with nearly 8 million people infected while 28 million are at risk of infection. (1) The current drugs against this disease have limited efficacy and often provoke harmful side effects. (1) In addition, several cases have been reported for the resistance of *T. cruzi* to these compounds. (1-2) The current scenario highlights the importance of studies on the development of new and more effective drugs against *T. cruzi*. The flavoprotein old yellow enzyme from *Trypanosoma cruzi* (TcOYE) is an oxidoreductase that uses NAD(P)H as cofactor. This enzyme is clinically relevant due to its role in the action mechanism of some trypanocidal drugs used in the treatment of Chagas disease by producing reactive oxygen species. (3) In this work, we have produced the recombinant TcOYE isoform from *T. cruzi* 17WTS strain and investigated its structural and dynamics properties by X-ray crystallography, small angle X-ray scattering, analytical ultracentrifugation and molecular dynamics. The holoenzyme structure was solved in two crystalline forms at 1.27 and 2.00 Å resolution and SAXS data pointed out that TcOYE displayed some intrinsic flexibility related to interfacial loops with high B-factors. Moreover, the binding mode of alpha-lapachone, a trypanocidal agent, and other naphthoquinones was investigated by molecular docking and dynamics suggesting that their binding to TcOYE are stabilized mainly by interactions with the isoalloxazine ring from FMN and residues from the active-site pocket. Thus, these analyses aim to contribute to a better understanding of parasite biology and development of new therapies against Chagas disease.

**Keywords:** *Trypanosoma cruzi*. Old yellow enzyme. Crystal structure.

#### Referências:

1 MAYA, J. D. et al. Chagas disease: Present status of pathogenic mechanisms and chemotherapy. **Biological Research**, v. 43, n. 3, p. 323-331, 2010.

2 WILKINSON, S. R.; KELLY, J. M. Trypanocidal drugs: mechanisms, resistance and new targets. **Expert Reviews in Molecular Medicine**, v. 11, e31-1-e31-24, 2009. doi:10.1017/S1462399409001252.

3 KUBATA, B. K. et al. A key role for old yellow enzyme in the metabolism of drugs by *Trypanosoma cruzi*. **Journal of Experimental Medicine**, v. 196, n. 9, p. 1241-1251, 2002.

## PG150

### **Microfuros na otimização da terapia fotodinâmica: uma comparação entre laser Er:YAG e microfuros mecânicos.**

RODRIGUES, P. G. S.<sup>1</sup>; MENEZES, P. F.C.<sup>1</sup>; FUJITA, A. K. L.<sup>1</sup>; JORGE, A. E. S.<sup>1</sup>; ANGARITA, D. P. R.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

phamilla@ymail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica (TFD) faz uso do conjunto de fotossensibilizador, luz específica, e do oxigênio celular com o intuito de ocasionar a morte e consequentemente a regeneração tecidual. Como conhecido, a TFD tem sido retratada na literatura para tratamento nas mais diversas áreas, dentre elas: Acne vulgar; fotorejuvenescimento; hidradenite supurativa; psoríase; câncer de pele não melanoma, e outros. (1) Dentre os fotossensibilizadores tópicos, se destacam o ácido 5-aminolevulínico (ALA) e o seu derivado metil-aminolevulinato (Metil-ALA) que são precursores da Protoporfirina IX (PpIX), fotossensível. Porém, uma das limitações desta terapia está na penetração do tópico para tratamentos de tumores mais profundos, e na necessidade de um tempo mínimo de incubação de 3 à 4 horas para uma efetiva produção desta Porfirina. Diante deste exposto, este resumo pretende divulgar resultados obtidos através de correntes estudos em que dispomos de diversas técnicas e ações externas com o intuito de potencializar a eficiência na entrega da droga e na produção da porfirina PpIX. Dentre pesquisas desenvolvidas, são apresentados aqui resultados relativos ao estudo *in vivo* utilizando a região dorsal de porcos. Neste é realizada uma comparação de imagens de fluorescência de campo amplo e de intensidade espectral de fluorescência da PpIX, após um período de incubação de 3 horas, entre tratamentos onde anteriormente a entrega do agente fotossensibilizador (ALA), foi realizado um único microfuro com laser Er:YAG em 83mJ e 116mJ, e, um único microfuro com agulha de tamanho aproximado de 0.80mm e 1.70mm. Concernente aos resultados, pode ser visto através das imagens de campo amplo uma distribuição homogênea da PpIX quando há a inclusão dos microfuros além de acréscimo na intensidade espectral da fluorescência da PpIX, com valores (em relação ao tratamento sem microfuros) de 4 e 6 vezes para microfuros com agulhas de 0.8 e 1.7mm e de 8 e 6 vezes para microfuros com laser Er:YAG com 83 e 116mJ, respectivamente. É importante frisar que a maior intensidade espectral de fluorescência da PpIX foi destacada ao caso do microfuro com Laser Er:YAG de menor energia, 83mJ, sendo, até mesmo superior ao caso do de maior energia e ao caso do microfuro com agulha de 1.7mm. Tal resultado nos faz induzir que há um benéfico papel dos microfuros, com destaque para o laser em energia apropriada, no estímulo de funções e metabolismo da célula que resultaram num aumento da produção de PpIX benéfica na eficiência ou até na redução do tempo de incubação para a terapia. Além do mais, estes resultados estão associados, também, a uma melhoria da profundidade de entrega da droga uma vez que os microcanais facilitam a sua permeação. (2,3) Sendo assim, os dois sistemas à laser e microfuros podem contribuir para uma maior eficiência em tratamentos por TFD, e, embora o laser tenha se mostrado mais benéfico em relação as agulhas, estas também alcançaram alta taxa de acréscimo da intensidade espectral da PpIX, e por serem mais viáveis economicamente podem estar sendo facilmente enquadrados nos tratamentos sendo uma nova esperança em casos de tratamento de lesões profundas.

**Palavras-chave:** Acréscimo na produção de Protoporfirina IX. Laser Er:YAG. Microfuro mecânico.

**Referências:**

1 TAUB, A.F. Photodynamic therapy: other uses. **Dermatologic Clinics**, v. 25, n. 1, p. 101-109, 2007.

2 LANKE, S. S. S.; KOLLI, C. S.; STROM, J. G.; BANGA, A. K. Enhanced transdermal delivery of low molecular weight heparin by barrier perturbation. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 365, n. 1-2, p. 26-33, 2009.

3 NICOLODELLI, G.; ANGARITA, D. P. R.; INADA, N. M.; TIRAPELLI, L. F.; BAGNATO, V. S. Effect of photodynamic therapy on the skin using the ultrashort laser ablation. **Journal of Biophotonics**, p. 132-140, 2013. doi:10.1002/jbio.201300024.

## PG151

### Referência atômica de tempo e frequência em um chafariz de átomos frios-segunda geração

RODRIGUEZ, S. A<sup>1</sup>; MAGALHAES, D. V<sup>2</sup>

andresro@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Referências precisas de frequência possuem inúmeras aplicações em pesquisa, desenvolvimento tecnológico industrial e serviços. Por um lado é sempre importante o desenvolvimento contínuo e a manutenção de referências de laboratório, que se situem no estado da arte da capacidade de reprodução de uma escala de tempo precisa. Por outro, levar a resolução de sinais com elevada estabilidade a aplicações remotas ou mesmo em constante movimentação tem sempre sido um grande desafio. Nosso grupo de pesquisa tem investido esforços em algumas frentes no desenvolvimento de referências metrológicas de frequência, com o desenvolvimento de padrões de laboratório baseados na transição relógio do átomo de Césio 133. (1) Esse projeto dá continuidade a alguns experimentos já em curso nos laboratórios em uma das linhas principais. Propomos utilizar a estrutura já existente para gerar uma nova geração de chafariz atômico para referência de tempo e frequência. Os trabalhos envolvem o projeto e a execução de um novo sistema de vácuo e cavidade de micro-ondas, desenvolvimento de novos sub-sistemas para a montagem óptica e o teste de novas técnicas de interrogação baseadas no método de Ramsey de campos oscilatórios separados.(2)

**Palavras-chave:** Relógio atômico. Estandares de tempo e frequência. Metodo de Ramsey.

#### Referências:

1 MAGALHAES, D. V. et al. . Progress toward a Cs-133 fountain as frequency standard in Brazil. **Laser Physics**, v. 14, n.2, p. 150-153, 2004.

2 SEIDEL, D.; MUGAS, J. Two-frequency Ramsey interferometry. **Physical Review A**, v.75, n.2, p.023811, 2007. doi:10.1103/PhysRevA.75.023811.

## PG152

### Estudos estruturais e moleculares das enzimas PtpA e PtpB como alvos moleculares para o tratamento da tuberculose.

RODRIGUEZ, V. K. T.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

vahkiraly@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

Tuberculose é uma doença infecto-contagiosa, causada pelo bacilo *Mycobacterium tuberculosis*. Apesar de estudos recentes indicarem uma queda significativa na porcentagem de mortes causadas por tuberculose, o número de pessoas acometidas com a doença ainda é alto, cerca de 8,7 milhões em 2011 (OMS - 2012). O surgimento de cepas resistentes aos fármacos utilizados no tratamento padrão atual é alarmante, o que nos leva a buscar novos fármacos que sejam eficazes frente à essas cepas resistentes. Para tanto, da análise do genoma do *M. tuberculosis*, foram identificadas duas proteínas tirosinas fosfatases (PtpA e PtpB), responsáveis pela sua sobrevivência nos macrófagos do hospedeiro. A inativação dos genes que codifica essas proteínas inviabilizou a sobrevivência do *M. tuberculosis* nos macrófagos, validando as Ptps como alvos terapêuticos atrativos para o desenvolvimento de novos fármacos. Nesse trabalho, serão realizados estudos de planejamento baseado na estrutura do alvo receptor (SBDD, do inglês, *structure-based drug design*) de inibidores da PtpB (e.g., sulfonil hidrazonas (1) e sulfonamidas (2)) e PtpA (e.g., chalconas (3)), com o objetivo de compreendermos seu modo de ligação e, assim, planejar modificações que possam otimizar a potência e seletividade. Um passo crucial para a determinação do modo de ligação dos inibidores será a obtenção de complexos moleculares (e.g., PtpA-inibidor e PtpB-inibidor). A análise dos complexos revelará informações moleculares relevantes sobre as interações e determinantes estruturais responsáveis pelo processo de reconhecimento molecular e afinidade.

**Palavras-chave:** Tuberculose. Proteínas tirosinas fosfatases. Inibidores.

#### Referências:

- 1 DE OLIVEIRA, K.N et al. Sulfonyl hydrazones of cyclic imides derivatives as potent inhibitors of the *Mycobacterium tuberculosis* protein tyrosine phosphatase B. **MedChemComm**, n. 6, p. 500-504, 2011. doi: 10.1039/C0MD00253D .
- 2 GRUNDNER, C. et al. Structural basis for selective inhibition of *Mycobacterium tuberculosis* protein tyrosine phosphatase PtpB. **Structure**, v. 15, n. 4, p. 499-509, 2007.
- 3 MASCARELLO, A. et al. Inhibition of *Mycobacterium tuberculosis* tyrosine phosphatase PtpA by synthetic chalcones: kinetics, molecular modeling, toxicity and effect on growth. **Bioorganic & Medicinal Chemistry**, v. 18, n.11, p. 3783-3789, 2010.

## PG153

### Crystal structure of *Schistosoma mansoni* adenylosuccinate lyase in complex with AMP

ROMANELLO, L.<sup>1</sup>; TORINI, J.<sup>1</sup>; BIRD, L.<sup>2</sup>; NETTLESHIP, J.<sup>2</sup>; OWENS, R.<sup>2</sup>; REDDIVARI, Y.<sup>2</sup>; BRANDÃO NETO, J.<sup>3</sup>; PEREIRA, H. D. M.<sup>1</sup>

larissa.romanello@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Oxford Protein Production Facility UK, Dicot, Oxfordshire

<sup>3</sup>Harwell Science and Innovation - Oxfordshire

*Schistosoma mansoni* is the parasite responsible for schistosomiasis, a disease that affects about 207 million people worldwide, and does not have the purine synthesis pathway, depending entirely on the purine salvage pathway to supply its demands on purines. (1) The purine salvage pathway has been reported as a potential target for developing new drugs against schistosomiasis. Adenylosuccinate lyase (SmADSL) is an enzyme in this pathway, that cleaves adenylosuccinate into adenosine 5'-monophosphate and fumarate. ADSL was amplified, cloned, expressed and purified at the Oxford Protein Production Facility (OPPF) in Harwell - UK. Robotic crystallization trials were performed and SmADSL crystallized in several conditions of the Morpheus crystallization kit. Several crystals were screened with x-rays and one dataset was collected for a crystal grown in the condition E12 (30mM of ethylene glycols, 120mM of Tris base/bicine pH8.5 12.5% of MPD, PEG1000 and P3350), on the macromolecular crystallography beamline I02 at Diamond up to 2.36 Å resolution. The crystal belongs to the I222 space group, with one monomer in the ASU. The structure was solved by the program Phaser using human ADSL as a search model. The refinement is being carried out by program Phenix. This structure will increase the structural information available about the *Schistosoma mansoni* purine salvage pathway.

**Keywords:** Adenylosuccinate Lyase. *Schistosoma mansoni*. Purine salvage pathway.

#### Referências:

1 CAFFREY, C. R. Chemotherapy of Schistosomiasis: present and future. **Current Opinion in Chemical Biology**, v.11, n.4, p.433-39, 2007.



## PG154

### A revised basin-hopping Monte Carlo method applied to the global optimization of nanoparticles

RONDINA, G. G.<sup>1</sup>; SILVA, J. L. F.<sup>2</sup>

rondina@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Theory and experiments suggest that nanoparticles (NPs) can provide significant contributions to the designing of new materials with specific properties which can be employed in catalysis and thus opening new possibilities for a wide range of technological applications. In contrast with bulk materials, in the case of NPs the identification of the atomic structure is still a challenge due to the intrinsic difficulties in accessing their atomic structures directly, e.g., NPs surface reconstruction, no long range order and reduced symmetry. In this context, global search algorithms are the most suitable approaches to obtain a better understanding of the atomic structure of NPs. The main hindrance in finding the ground state structure of a NP through a configuration space search lies in the fact that the potential energy surface (PES) describing the allowed configurations of the NP contains a large number of local minima, therefore an efficient algorithm is necessary. An algorithm that has been very successful for global optimization of NPs is the Basin-Hopping Monte Carlo (BHMC) algorithm, in which the PES is explored through its local minima. Despite its success, in the case of unbiased randomly initialized NPs, the BHMC as a standalone technique has been restricted to well known empirical systems and a small group of first-principles NPs. In this poster we present suggestions for improving the BHMC algorithm for unbiased global optimization of NPs. (1) The traditional BHMC algorithm is improved by bringing together novel strategies and techniques employed in different global optimization methods, however with the care of keeping the underlying algorithm of BHMC unchanged. The improvements include a total of eleven local and nonlocal trial operators tailored for NPs that allow an efficient exploration of PES, two different strategies (static and dynamic) of operator selection, and a filter operator to handle unphysical solutions. To assess the efficiency of our strategies, we applied our implementation to several classes of systems, including Lennard-Jones and Sutton-Chen NPs with up to 147 atoms, a set of larger Lennard-Jones NPs with sizes ranging from 200 to 1500 atoms, binary Lennard-Jones clusters with up to 100 atoms, (AgPd)<sub>55</sub> alloy clusters described by the Sutton-Chen potential, and aluminum clusters with up to 30 atoms described within the density functional theory framework. Using unbiased global search our implementation was able to reproduce successfully almost all published results for these systems, and in many cases with more efficiency than the standard BHMC. We were also able to locate previously unknown global minimum structures for a few systems. The revised BHMC method presented in this poster is a valuable tool for theoretical investigations of the atomic structures of NPs.

**Keywords:** Global optimization. Nanoparticles. Structural modeling.

**Referências:**

1 RONDINA, G. G.; SILVA, J. L. F. A revised basin-hopping Monte Carlo method applied to the global optimization of clusters and nanoparticles. **Journal of Chemical Information and Modeling**, Aug. 2013. In press. doi: 10.1021/ci400224z.

## PG155

### Correlações entre medidas de centralidade: comportamento, efetividade e diferenciação de redes complexas

RONQUI, J. R. F.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>

jose.ronqui@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As redes complexas podem ser utilizadas para representar uma grande variedade de sistemas complexos; como exemplo podemos citar as redes sociais ou de computadores, mercado de ações, simulações climáticas, redes de interação de proteínas dentre diversos outros. (1) Em diversas aplicações, como em ataques na rede para estudos de sua resiliência ou ainda na detecção de comunidades ou até mesmo para identificar estruturas importantes do sistema considerado, torna-se necessário identificar os nós importantes da rede complexa. Para suprir tal necessidade, diversas medidas, considerando diferentes ideias de como um nó pode ser importante, foram desenvolvidas para identificar os nós vitais para a rede, as chamadas medidas de centralidade. (2) Neste trabalho, avaliaremos três aspectos básicos: a existência de correlação entre medidas distintas, o quão efetivas as diferentes medidas são em identificar nós importantes, e a diferença entre essas correlações para redes geradas utilizando dados reais e algumas redes que utilizam modelos propostos na literatura. (3) Nossos resultados demonstraram que existe correlação entre as medidas de centralidade. Além disso, as medidas baseadas em *betweenness* mostraram-se mais efetivas tanto para a diminuição da eficiência da rede, quanto para a redução da quantidade de elementos na maior componente da rede. Em um trabalho recente, demonstramos que é possível diferenciar redes reais entre si e de redes geradas por modelos teóricos utilizando os coeficientes de correlação entre medidas de centralidade, o que acreditamos ser um resultado original que poderá contribuir para o desenvolvimento de modelos mais realistas de redes.

**Palavras-chave:** Redes complexas. Medidas de centralidade. Correlações.

#### Referências:

- 1 NEWMAN, M. E. J. **Networks**: an introduction. Oxford: Oxford University Press, 2010. 772p.
- 2 IYER, S.; KILLINGBACK, T.; SUNDARAM, B.; WANG, Z. Attack robustness and centrality of complex networks. **PLoS ONE**, v. 8, n. 4, p. e59613, 2013.
- 3 BOCCALETTI, S.; LATORA, V.; MORENO, Y.; CHAVEZ, M.; HWANG, D. U. Complex networks: structure and dynamics. **Physics Reports**, v. 424, n. 4-5, p. 175-308, 2006.

## PG156

### Structural and functional studies of c-di-GMP transmembrane receptors involved in virulence and bacterial biofilm formation

ROSSETO, F. R.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

flavio.rosseto@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The formation of bacterial biofilms is a well-known phenomenon, characterized by the formation of a static bacterial community, embedded in an exopolymeric matrix. However, this process has only recently been elucidated at the molecular level, revealing a new signaling molecule, c-di-GMP, as a key regulator of mobility, cell adhesion and exopolysaccharide synthesis(1). Protein domains catalyzing the synthesis (GGDEF) and degradation (EAL and HD-GYP) of c-di-GMP have been identified in a large number of proteins in almost every bacterial genome sequenced to date. Together with c-di-GMP turnover enzymes, a broad spectrum of c-di-GMP effector proteins has also been identified. These include transcription factors, FleQ and VpsT, Pilz domains, "riboswitches", degenerate EAL and GGDEF domains. The latter class includes the protein LapD from *Pseudomonas fluorescens*, a transmembrane c-di-GMP receptor essential for biofilm formation under conditions of nutritional stress. LapD is composed of a periplasmic interaction domain (PD), followed by a single transmembrane helix (TM), a HAMP domain and a degenerate dual GGDEF-EAL module in the cytoplasmatic portion (2). Binding of c-di-GMP to the degenerate EAL domain increases the affinity of PD for the periplasmic protease LapG, preventing the degradation of the surface adhesin LapA, thus stabilizing the biofilm. Studies have partially demonstrated LapD molecular mechanism, however a series of functional characteristics of this sub-family of proteins with the architecture PD-TM-HAMP-GGDEF-EAL still need further elucidation (3). Accordingly, this work aims the structural determination and biophysical studies of conformational changes of the protein STM3615 from *Salmonella enterica*, a protein with the same architecture of LapD that probably is involved in cell invasion and virulence. The signaling pathways mediated by this molecule represents a great opportunity for the development of new therapies against chronic infections. After the determination of expression and purification protocol of cytoplasmatic domain cloned into expression vectors, we crystallized two constructions of GGDEF-EAL domain and we verified the phosphodiesterase activity of STM3615. The product of c-di-GMP degradation, pGpG, was identified and confirmed by mass spectrometry.

**Keywords:** c-di-GMP. Bacterial biofilm. Membrane protein.

#### Referências:

1 ROSS, P.; MAYER, R.; BENZIMAN, M. Cellulose biosynthesis and function in bacteria. **Microbiology Reviews**, v. 55, n. 1, p. 35-58, Mar. 1991.

2 GALPERIN, M. Y.; NIKOLSKAYA, A. N.; KOONIN, E. V. Novel domains of the prokaryotic two-component signal transduction systems. **FEMS Microbiology Letters**, v. 203, n. 1, p. 11-21,

2001.

3 NAVARRO, M. V. A. S.; NEWELL, P. D.; KRASTEVA, P.V.; CHATTERJEE D.; MADDEN, D.R.; O'TOOLE G.A.; SONDERMANN, H. Structural basis for c-di-GMP-mediated inside-out signaling controlling periplasmic proteolysis. **PLoS Biology**, v. 9, n. 2, p. e1000588, 2011.

## PG157

### Simulação de efeitos quânticos relativísticos em armadilhas iônicas.

ROSSETTI, R. F.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

rafael.rossetti@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Apresentou-se recentemente um protocolo para a simulação da equação de Dirac e efeitos quânticos relativísticos, Zitterbewegung e Klein paradox, em armadilhas iônicas. Essencialmente, o acoplamento da posição com o spin da partícula relativística, que naturalmente decorre do formalismo de Dirac, é simulado nas armadilhas iônicas através do acoplamento de movimento vibracional do íon com seus níveis eletrônicos, mediados por um campo de radiação clássico. Além disso, o estado de superposição de energias positiva e negativa que no formalismo de Dirac introduz o movimento conhecido como Zitterbewegung, decorre no contexto dos íons armadilhados, da engenhosa simulação dos acoplamentos dos tipos carrier, blue e red sidebands. (1) Nosso trabalho tem como objetivo a simulação matemática do unusual Zitterbewegung, o análogo na física dos semicondutores do movimento de tremulação na direção de propagação da partícula produzido pelo acoplamento Rashba. (2) Neste unusual Zitterbewegung observa-se movimentos cicloidais na ausência de campos magnéticos, o que simulamos em Paul Trap. O acoplamento dos níveis vibracionais do íon com seus níveis eletrônicos, é realizado nos regimes de bandas laterais resolvidas e Lamb-Dickie, produzindo matematicamente o acoplamento Rashba. O efeito de tremulação produzido em uma armadilha bidimensional nas direções vibracionais  $x$  e  $y$ , permite o controle do movimento do íon, mostramos tal feito através das figuras de Lissajous. Além disso, utilizando o mesmo sistema físico e com uma escolha adequada de parâmetros conseguimos utilizar a técnica de engenharia de reservatório para criar um protocolo para produzir a proteção de estados de Fock.(3)

**Palavras-chave:** Simulação em armadilha iônica. Zitterbewegung. Proteção de estados quânticos.

#### Referências:

- 1 LAMATA, L.; LEON, J.; SCHÄTZ, T.; SOLANO, E. Dirac equation and quantum relativistic effects in a single trapped ion. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 25, p. 253005-1-253005-4, 2007.
- 2 BERNARDES, E.; SCHLIEMANN, J.; LEE, M.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. **Physical Review Letters**, v.99, n. p. 076603-1-076603-4, 2007.doi:10.1103/PhysRevLett.99.076603.
- 3 CARVALHO, A. R. R.; MILMAN, P.; DE MATOS FILHO, R. L.; DAVIDOVICH, L. Decoherence, pointer engineering, and quantum state protection. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 22, p. 4988-4991, 2001.

## PG158

### The role of the *sp-d* hybridization in the crystal structure of transparent conducting oxides: The example of the $A_2O_3$ ( $A = Al, Ga, In$ ) oxides

SABINO, F. P.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, L. N.<sup>1</sup>; SILVA, J. L. F.<sup>2</sup>

fernandopsabino@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Transparent conducting oxides (TCO) combine the electrical properties of a metal system with a transparence of about 90% in the visible light spectrum. Thus, TCOs have been used in a wide range of technological applications such as flat panel displays, organic light emitting diodes, transistors, photovoltaics, etc. (1) For many years doped  $In_2O_3$ ,  $Ga_2O_3$ , and  $Al_2O_3$  oxides have been the base materials for TCOs applications. Nonetheless, although several experimental and theoretical studies have been reported, our basic understanding of those materials is still far from satisfactory. For example, In, Ga, and Al have the same number of valence electrons; however, the respective ground-state structures are bixbyite ( $Ia\bar{3}$ ), gallia ( $C2/m$ ), and corundum ( $R\bar{3}c$ ). To better understand the relative structural stability, we here report a Density Functional Theory investigation of the stability of those oxides in several crystal model structures employing the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP). For the exchange-correlation approximation, we employed the generalized gradient approximation (GGA) and the Hubbard-U model to control (decrease or increase) the localization of the *d*-states in the In and Ga oxides. To obtain the equilibrium volume of the oxides structures we minimize the stress tensor and the atomic forces on every atom using a cutoff energy of 600 eV and k-point grid of  $3\times3\times3$  for the Brillouin zone integration in the  $In_2O_3$  bixbyite. The same k-points density was used for the others structures. We found that DFT-GGA yields the correct ground-state structures for the  $In_2O_3$ ,  $Ga_2O_3$ , and  $Al_2O_3$  oxides, which is consistent with experimental results. Our results and analyses indicate that the hybridization of the *sp-d* states is an important parameter in the stability of the bixbyite and gallia structures, e.g., an artificial reduction in the *sp-d* hybridization using the Hubbard-U model increase the stability of the bixbyite structure. Also, this model allows us to analyze the average radius of the metal, showing that the corundum structural stability decrease as the average radius increases. This explain why the corundum is the  $Al_2O_3$  ground-state phase while it is a high-energy structure for  $In_2O_3$  and  $Ga_2O_3$ , a conclusion drawn from high-pressure experiments. Therefore, the average radius of metal and the relative position of the *d*-states within the *sp*-band plays an important role in the stability of the bixbyite, gallia and corundum structures.

**Keywords:** Transparent conducting oxides. Gallium oxide. Indium oxide.

#### Referências:

1 NOMURA, K.; OHTA, H.; TAKAGI, A.; KAMIYA, T.; HIRANO, M.; HOSONO, H. Room-temperature



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

fabrication of transparent flexible thin-film transistor using amorphous oxide semiconductors. **Nature**, v. 432, n. 7016, p. 488-492, 2004.



## PG159

### Study of the threshold dose distribution using three dimensional cell cultures based on magnetic levitation

SABINO, L. G.<sup>1</sup>; KILLIAN, T. C.<sup>2</sup>; SOUZA, G. R.<sup>3</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

lgsabino@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Department of Physics and Astronomy - Rice University - Houston - USA

<sup>3</sup>Nano3D Biosciences Inc - Houston - USA

We have used three dimensional cell cultures (3-D) of Hep G2 and MDA-MB-321 to test cytotoxicity of photodynamic therapy (PDT). In addition, the properties of the threshold dose distribution and its influence in multi-session PDT effect has been evaluate. (1) To generate 3-D cell cultures we first delivered a hydro-gel consisting of gold, magnetic iron oxide nano-particles and filamentous bacteriophage to cells in a flask containing cells in 80% of confluence and incubated overnight. After that we detached cells using trypsin, counted them, transferred them to a 24 well plate  $2 \times 10^7$  cells per well, and placed a magnetic driver on the top of the plate. (2) After 3 days of levitation, we positioned the magnetic drive to the bottom of the plate; let the culture settle down in the bottom of the well, and add the photosensitizer Photogem (PG) in the culture media in concentrations of 50, 25, 12.5, 6.25, 3.125  $\mu\text{g/ml}$ , including a control group that contains only media. Than incubate them for 24 hours. Next, we washed the cultures with PBS and added fresh media, and illuminated the samples for 900 s. We used a 630 nm LED-based device called BioTable<sup>®</sup> containing a filter mask that generates light intensities of 26, 17, 13  $\text{mW/cm}^2$  and a dark region as a control light. The light fluence in the samples was 23.4, 15.2, and 11.7  $\text{J/cm}^2$ . Following the illumination, we added fresh media, and 30 hours after, we used microscopy to evaluate morphology changes. Next we broke the 3-D structures and seeded cells in 96 well plates, 105 cells per well, with a magnetic drive coupled on the bottom of the plate to create culture dots. Using the IPod system created by n3D Biosciences Inc., we monitored the changes of the culture dot geometry and changes of the color of the media for 3 days by taking pictures every 900 s. In addition, we used a live and dead assay to evaluate PDT cytotoxicity. Evaluating the morphology by microscopy, we verified Hep G2 forms more dense cultures than MDA-MB-231 making the PG uptake facilitated for MDA-MB-231 cell culture. The PDT effect in MDA-MB-231 cells is higher when compared to the effect of PDT in Hep G2 cells. The changes in the color of the media caused by the presence of phenol red, specifically in the Hue parameter, pointed out the decrease of the media pH and correlates with the culture metabolism rate. For example, Hep G2 control group turn the media from red to yellow (maximum change of Hue computed) in 12 hours, while the group 3.125  $\mu\text{g/ml}$  of PG took 24 hours, and the group treated with 6.25  $\mu\text{g/ml}$  of PG took 48 h. The results show that the 3-D cell culture based on magnetic levitation is a powerful tool for cytotoxicity studies of new photosensitizers, and for dosimetry of multi-session PDT; 3-D cell culture still should be adapted for better results.

**Keywords:** Photodynamic therapy. 3-D cell culture. Photogem.

## Referências:

- 1 SOUZA, G. R. et al. Three-dimensional tissue culture based on magnetic cell levitation. **Nature Nanotechnology**, v. 5, n. 4, p. 291-296, 2010.
- 2 SABINO, L. G. et al. Experimental evidence and model explanation for cell population characteristics modification when applying sequential photodynamic therapy. **Laser Physics Letters**, v. 8, n. 3, p. 239-246, 2011.

## PG160

### Estudos de cristalização do ElrR

SALCEDO, D. L. P.<sup>1</sup>; REBOREDO, E. H.<sup>1</sup>

palomino@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A ElrA é uma proteína que se expressa na invasão do *Enterococcus faecalis* (1) no corpo humano. *Enterococcus faecalis* é a primeira causa de infecções hospitalares por bactérias no Brasil e no mundo. (2) A ElrR é a proteína que regula a expressão do ElrA. (3) Ela faz parte de uma família de proteínas de regulação de expressão, conhecidas como RGG (regulator gene for glucosyltransferase). Neste projeto nos vamos tentar obter a estrutura da ElrR por cristalografia de raios-X. Para obter cristais de ElrR será feito, a expressão da proteína em *E. Coli* nos meios LB e 2XYT, o lise das células por ultrassom, a purificação através de diferentes técnicas cromatográficas usando colunas de afinidade e gel filtração e testes de cristalização em diferentes precipitantes, aditivos e tampões. Obter esta estrutura é importante para conhecer o mecanismo de invasão do *Enterococcus faecalis* e trabalhar numa forma de controle da infecção.

**Palavras-chave:** *Enterococcus faecalis*. Proteína ligação DNA. Regulador da expressão.

#### Referências:

- 1 BIEDENBACH, D. J.; MOET, G. J.; JONES, R. N. Occurrence and antimicrobial resistance pattern comparisons among bloodstream infection isolates from the SENTRY Antimicrobial Surveillance Program 1997 to 2002. **Diagnostic Microbiology and Infectious Disease**, v. 50, n. 1, p. 59-69, 2004.
- 2 BRINSTER, S.; POSTERARO, B.; BIERNE, H.; ALBERTI, A.; MAKHZAMI, S.; SANGUINETTI, M.; SERROR, P. Enterococcal leucine-rich repeat-containing protein involved in virulence and host inflammatory response. **Infection and Immunity**, v. 75, n. 9, p. 4463-4471, 2007.
- 3 DUMOULIN, R.; CORTES-PEREZ, N.; GAUBERT, S.; DUHUTREL, P.; BRINSTER, S.; TORELLI, R.; SANGUINETTI, M.; POSTERARO, B.; REPOILA, F.; SERROR, P. Enterococcal Rgg-like regulator ElrR activates expression of the elrA operon. **Journal of Bacteriology**, v. 195, n. 13, p. 3073-3083, 2013.

## PG161

### Electron spin resonance of antiferromagnetic systems: multiferroics, conducting polymers and ludwigites.

SANTANA, V. T.<sup>1</sup>; WALMSLEY, L.<sup>2</sup>; NASCIMENTO, O. R.<sup>1</sup>

vstadeu@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Rio Claro - UNESP

Multiferroics are materials which present magnetic order and ferroelectricity. Besides they can have their electrical polarization altered through a magnetic field. The oxide  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  is known as a type 2 multiferroic material with Néel temperature about 40 K. (1) Doped polyanilines are conducting polymers which can present antiferromagnetic ordering. This fact was evidenced through Electron Spin Resonance (ESR) and other techniques in recent works. (2) The magnetic behavior is associated with coupled spin 1/2 polarons. The ludwigites  $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$  are mixed valence iron compounds with very interesting electronic and magnetic properties which show charge ordering below 220 K, an antiferromagnetic transition at 112 K and weak ferromagnetism below 70 K. (3) In this work, antiferromagnetic interactions of polycrystalline samples of the multiferroic  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$ , of doped polyanilines and of monocrystalline samples of the ludwigite  $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$  are being studied through ESR technique. Simulations and fittings of the ESR spectra can give detailed information about the local structure and the magnetic interactions present in those systems. The variation of the X-band ESR signal intensity with temperature has already been measured for  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  and  $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$  with a maximum being observed about 40K and 60K, respectively, as evidence of magnetic transitions.

**Keywords:** ESR. Magnetic properties. Antiferromagnetism.

#### Referências:

- 1 KIM, J.W. et al. Observation of a multiferroic critical end point. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 106, n. 37, p. 15573-15576, 2009.
- 2 SANTANA, V. T.; NASCIMENTO, O. R.; DJURADO, D.; TRAVERS, J. P.; PRON, A.; WALMSLEY, L. Evidence of weak ferromagnetism in doped plasticized polyaniline (PANI-DoESSA)0.5 from electron spin resonance measurements. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 25, n. 11, p. 116004-1-116004-6, 2013.
- 3 DUMAS, J. et al. Electron paramagnetic resonance in  $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$ . **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 226-230, pt. 1, p. 468-469, May 2001.

## PG162

### Multicharged vortices stability in Bose-Einstein condensates

SANTOS, A. C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; HOYOS NETO, J. A.<sup>1</sup>

cidrim@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

One of the most interesting subjects of modern physics is using atomic superfluids to investigate quantum phenomena, such as vortices formation. Once we have a mean-field description of the problem, we can generally attribute a macroscopic wave-function of the type  $\Psi(\mathbf{r}) = f(r)e^{i\kappa\phi}$  to a Bose-Einstein condensate. The stability of vortices with large circulation, that is with  $\kappa \gg 1$ , is still under-explored. (1-3). Particularly, in the case of finite temperature, the influence of the thermal component in their decay constitutes an important question to be answered. Moreover, a system composed by two different species, whereas the mutual interaction can be manipulated, is peculiar for allowing us understanding the background effect over the multicharged vortices decay. In this doctorate project, we shall deal with these problems described above. With the knowledge acquired, we look for understanding the multicharged vortices decay when they are part of a vortex lattice ( Abrikosov type) in the fundamental state. This study may contribute for shedding light on some essential aspects of phenomena such as quantum turbulence.

**Keywords:** Bose-Einstein condensate. Vortices. Finite temperature.

#### Referências:

- 1 HUHTAMAKI, J.; MOTTONEN, M.; VIRTANEN, S. . Dynamically stable multiply quantized vortices in dilute Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 74, p. 063619, Dec. 2006.
- 2 LUNDH, E. Multiply quantized vortices in trapped Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 65, n.4, p. 043604, March 2002.
- 3 KUOPANPORTTI, P.; MOTTONEN, M. Splitting dynamics of giant vortices in dilute Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 81, n. 3, p. 033627, March 2010.

## PG163

### Reduced graphene oxide films for application in estradiol detection

SANTOS, F. A.<sup>1</sup>; JANEGITZ, B. C.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

fabricaoaps@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Graphene is new class of two-dimensional carbon nanostructure, which exhibits extraordinary properties and a variety of applications in different areas, mainly in sensors. One of the critical limitations of graphene synthesis is the stabilization of its solution, since it is necessary to preserve the individual properties of each sheet. Estradiol (17- $\beta$ -estradiol) is a natural steroid estrogen that is important in many physiological processes and influences the development of sexual characteristics (1). Estradiol deficiency can cause diseases such as hyperandrogenism, osteoporosis, and menopausal symptoms. The detection of estradiol is important to the prevention and treatment of related diseases that occur due this hormone's dysfunction. We prepared graphene oxide (GO) from polycrystalline graphite by a modified Hummer's method (2), using  $NaBH_4$  as reducer and Dihexadecylphosphate (DHP) as stabilizer to obtain stable colloidal suspension of reduced graphene oxide (RGO). Thin films of RGO/DHP/SDS were prepared by casting on glassy carbon electrode. We studied the voltammetric behavior RGO/DHP/SDS/GC electrode in the presence of estradiol and the results showed an irreversible oxidation peak at 0.6 V. Under optimal conditions we obtained an analytic curve using linear sweep voltammetry (LSV), in which the oxidation of estradiol was linear over the concentration range from  $4.0 \times 10^{-7}$  to  $2.0 \times 10^{-5}$  mol L<sup>-1</sup>. The detection limit was  $7.7 \times 10^{-8}$  mol L<sup>-1</sup>, the repeatability and reproducibility showed RSD of 3.7% and 6.4%, respectively. Our strategy opens several technological applications and our findings make it possible to produced graphene in large scale, low cost and stable in biosensing.

**Keywords:** Reduced graphene oxide. Estradiol. Biosensor.

#### Referências:

- 1 JANEGITZ, B.C. et al. Direct electron transfer of glucose oxidase at glassy carbon electrode modified with functionalized carbon nanotubes within a dihexadecylphosphate film. **Sensors Actuator B:chemical**, v. 158, n.1, p. 411-417, 2011.
- 2 TUNG, V.C. et al. High-throughput solution processing of large-scale graphene. **Nature Nanotechnology** v. 4, p. 25-29, 2009. doi:10.1038/nnano.2008.329.

## PG164

### Epidemiologia molecular de Enterobacteriaceae produtoras de KPC isoladas na região de São Carlos

SANTOS, J.<sup>1</sup>; CAMARGO, I. L. B. C.<sup>1</sup>

jessicadsanti@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Os carbapenems são antibióticos usados para o tratamento de patógenos Gram-negativos multiresistentes, produtores de beta-lactamases. O surgimento de carbapenemases conferiu resistência aos carbapenems, reduzindo o número de opções terapêuticas e elevando a mortalidade de pacientes. Neste estudo, avaliaremos 68 amostras potenciais produtoras de *Klebsiella pneumoniae* carbapenemase (KPC) (1), isoladas de 55 pacientes no período de abril de 2011 a maio de 2013 na região de São Carlos, SP. As amostras incluem exemplares de *Enterobacteriaceae* (*Enterobacter cloacae*, *Enterobacter aerogenes*, *Enterobacter amnigenus* 2, *Escherichia coli*, *Citrobacter freundii*, *Klebsiella pneumoniae*, *Morganella morganii*, *Serratia marcescens* e *Serratia fonticola*), todas de infecção. A confirmação fenotípica se baseará em testes de disco difusão (ertapenem, meropenem e imipenem) e teste de Hodge modificado (MHT) para a detecção das classes A (KPC), B (NDM-1, IMP, VIM) e D (OXA-48) de Ambler. O gene *bla*<sub>KPC</sub> (transposon Tn4401) será detectado e caracterizado quanto ao seu ambiente genético. Os plasmídeos que não estiverem integrados ao cromossomo das amostras serão detectados via separação por tamanho por PFGE e determinaremos o número bem como o tamanho dos mesmos. Caracterizaremos o perfil de sensibilidade através de testes com carbapenems (ertapenem, imipenem e meropenem) e oximino-cefalosporinas (cefotaxima, ceftazidima e ceftriaxona). Através de PFGE e MLST, identificaremos e determinaremos o perfil de clonalidade e linhagens envolvidas. Espera-se caracterizar molecularmente as amostras produtoras de KPC da região de São Carlos e saber se há uma dispersão clonal existente entre as espécies produtoras desta enzima.

**Palavras-chave:** KPC. Carbapenemase. *Enterobacteriaceae*.

#### Referências:

1 YIGIT, H.; QUEENAN, A. M.; ANDERSON, G. J.; DOMENECH-SANCHEZ, A.; BIDDLE, J. W.; STEWARD, C. D.; ALBERTI, S.; BUSH, K.; TENOVER, F. C. Novel carbapenem-hydrolyzing beta-lactamase, KPC-1, from a carbapenem-resistant strain of *Klebsiella pneumoniae*. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 45, n. 4, p. 1151-1161, 2001.

## PG165

### Structural basis for GL479 a dual peroxisome proliferator-activated receptor $\alpha/\gamma$ agonist

SANTOS, J. C.<sup>1</sup>; AMOROSO, R.<sup>2</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

jademilsonsantos@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi 'G. d'Annunzio'

Peroxisome proliferator-activated receptors (PPAR) are members of the nuclear receptors superfamily and they function as transcription factors activated by synthetic and natural ligands, which include fatty acids and its metabolites. There are three subtypes PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$  and PPAR $\gamma$ . (1) The PPARs have shown an important role in regulating glucose, lipids and cholesterol metabolism. PPAR $\alpha$  activation would lead to the effects observed for the fibrates, for example, including lowering of triglycerides and increase in HDL, whereas PPAR $\gamma$  activation could result in the diabetic treatment, as observed for thiazolidinediones (TZD). (2) A number of molecules have been synthesized looking for dual PPAR $\alpha/\gamma$  agonists. The dual PPAR $\alpha/\gamma$  agonists are molecules that combine structural features of the glitazones and fibrates in single compound able to activate both PPAR $\alpha$  and PPAR $\gamma$ . The search for a dual PPAR $\alpha/\gamma$  agonists is of great interest to pharmaceutical industry because the synthesis of this compound combines two therapeutic effects in a single molecule. Here we determined the crystal structures of the ligand binding domain (LBD) of human PPAR $\alpha$  and PPAR $\gamma$  in complexes with GL479. The GL479 is a dual PPAR $\alpha/\gamma$  agonist that was synthesized based on a combination of two pharmacophores: the classic clofibric acid (the active metabolite of clofibrate) and lipophilic group derived from natural product stilbene. (3) The complexes were crystallized using hanging drop vapor diffusion method at 293 K. The structures were solved by molecular replacement at 2.3 and 1.8 Å resolution, for PPAR $\alpha$  and PPAR $\gamma$ , respectively. Structure refinements were achieved by iterated cycles of manual building and coordinates and B-factors automatic adjustments. For PPAR $\alpha$  the structure the final model consists of a monomer in the asymmetric unit. The ligand adopts a conformation within the receptor that allows the acidic head group to form hydrogen bonds with Ser-280 and Tyr-314 on helix 5, His-440 on helix 11 and Tyr-464 on the AF2 helix. His-440 also interacts with oxygen of the ether group of the skeleton of clofibrate. The PPAR $\gamma$  structure was composed of two molecules in the asymmetrical unit. One of the molecules has its H12 in an open conformation (Chain A) and in the symmetrical molecule (Chain B) with H12 in a closed state. The ligand GL479 appears in the both molecules, but with different binding modes, depending on the H12 conformation. In the active conformation represented by chain A, H12 is found in a closed state, the ligand GL479 polar contacts are formed with Ser-289, His-323, His-449 and Tyr-473. The others contacts that stabilized the protein are formed by hydrophobic interactions. The crystallographic studies showed different binding modes for each receptor. In both complexes the interaction is dependent of H12. For PPAR $\alpha$ , the GL479 acts as full agonist whereas that for PPAR $\gamma$  revealed a partial agonist dependent H12.

**Keywords:** PPARs. Dual agonist. Protein crystallography.



### Referências:

- 1 BERGER, J.; MOLLER, D. E. The mechanisms of action of PPARs. **Annual Review of Medicine**, v. 53, p. 409-435, 2002. doi: 10.1146/annurev.med.53.082901.104018.
- 2 KOTA, B. P.; HUANG, T. H.; ROUFOGALIS, B. D. An overview on biological mechanisms of PPARs. **Pharmacological Research**, v. 51, n. 2, p. 85-94, 2005.
- 3 GIAMPIETRO, L. et al. Synthesis and structure activity relationships of fibrates-based analogues inside PPARs. **Bioorganic e Medicinal Chemistry Letters**, v. 22, n. 24, p. 7662-7666, 2012.

## PG166

### Estudo da adsorção de monocamadas de água em gesso através de óptica não-linear

SANTOS, J. C. C.<sup>1</sup>; MIRANDA, P. B.<sup>1</sup>

jaciaracassia@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A água é, certamente, o líquido mais importante na terra e foi amplamente investigada no passado. Entretanto, o nosso entendimento de suas propriedades interfaciais somente foi possível com avanços recentes em técnicas espectroscópicas e microscópicas possibilitaram esse estudo de interfaces (1). As regiões de interface entre dois meios são, frequentemente, sítios ativos de reações determinantes nas propriedades macroscópicas de todo o sistema. Superfícies hidrofílicas de um material sólido adsorvem água quando expostos a umidade. As propriedades desses filmes desempenham um papel importante na química ambiental e atmosférica e em fenômenos biológicos (2). A espessura desses filmes pode variar de uma a várias monocamadas moleculares e, conseqüentemente, sua estrutura pode ser fortemente influenciada pelas condições de contorno associadas ao substrato e ao vapor nos dois lados. Pretende-se utilizar as técnicas ópticas não lineares, geração de soma de frequências (SFG) e geração de segundo harmônico (SHG), para estudar a estrutura de monocamadas de água formadas no gesso ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ), à temperatura ambiente, em equilíbrio com vapor de água em diversos valores de umidade relativa. O uso dessas técnicas permitirá entender a nível molecular como é a orientação média e a rede de ligações de hidrogênio das moléculas de água no filme, além de possibilitar o entendimento de interações moleculares na interface, e entender como sua interação com a superfície do gesso pode explicar a excepcional resistência mecânica do gesso microcristalino prensado, que foi recentemente observada (3).

**Palavras-chave:** Óptica não-linear. Geração de segundo harmônico. Gesso.

#### Referências:

- 1 VERDAGUER, A. SACHA; G. M. BLUHM; H. SALMERON, M. Molecular structure of water at interfaces: wetting at the nanometer scale. **Chemical Reviews**, v. 106, n. 4, p. 1478-1510, 2006.
- 2 LAMBERT, A.; DAVIES, P.; NEIVANDT, D. Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: a tutorial review. **Applied Spectroscopy Reviews**, v. 40, n. 2, p. 103-145, 2005.
- 3 CORREIA, C. M. P.; SOUZA, M. F. Mechanical strength and thermalconductivity of low-porosity gypsum plates. **Materials Research**, v. 12, n. 1, p. 95-99, 2009.

## PG167

### Utilização da equação de Langevin em RMN aplicada ao estudo de meios porosos

SANTOS, M. L.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>; MAIA, L. P.<sup>1</sup>

millenalogrado@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma importante ferramenta para obtenção de informações em meios porosos, muito utilizada pela indústria petrolífera. Sabe-se que a precessão dos spins e o processo de relaxação nuclear podem ser descritos pelas equações fenomenológicas de Bloch. No entanto, se for adicionada ao sistema a flutuação das posições das partículas submetidas a um reservatório térmico com flutuação Browniana (e sendo descritas pelas equações de Langevin), a magnetização resultante sofre uma defasagem (relaxação) que não está incluída nas equações de Bloch. O método adotado para adição de tais flutuações assume que as moléculas que portam os spins nucleares executam *random walks* discretos e lineares no tempo, tornando a defasagem a soma de variáveis aleatórias. Usando o teorema do limite central (1), passa-se esse sistema para o contínuo e encontra-se as equações de Bloch-Torrey (2), que são as equações Bloch modificadas para levar em consideração a difusão que geralmente ocorre por auto-difusão das moléculas que contêm os núcleos. As equações de Bloch-Torrey têm como soluções exponenciais com argumentos de potência cúbica no tempo e do gradiente de campo magnético. Esse último termo está relacionado com o tamanho do poro, pois ele é gerado pela diferença de susceptibilidade magnética na interface entre as superfícies de contato do poro e do líquido que o satura, sendo, geralmente, mais intenso para poros menores. No entanto, a solução da equação de Bloch-Torrey falha ao ser aplicada para conjuntos de poros que variam de tamanho, pois ocorrerão variações nos argumentos das exponenciais. A proposta para tratar essa questão é modificar a dependência linear do *random walk* no tempo. Ao passar este problema para a difusão anômala, é adotado um expoente não inteiro para o tempo (relação não-linear), fato que gera dimensões fractais. Reescreve-se então o problema utilizando a difusão anômala e convertendo as equações de Bloch-Torrey para a forma fractal. Este formalismo já foi aplicado para correções de artefatos em imagens por RMN, devido à difusão molecular. (3) Agora o objetivo é efetuar os cálculos das Equações de Bloch, levando em conta a difusão molecular, que pode ser anômala, e correlacioná-los aos resultados experimentais como a distribuição dos tamanhos dos poros.

**Palavras-chave:** Bloch-Torrey. Difusão anômala. Meios porosos.

#### Referências:

1 COFFEY, W. T.; KALMYKOV, Y. P.; WALDRON, J. T. **The Langevin equation**. 2nd ed. Singapore: World Scientific. 2004.

2 TORREY, H. C. Bloch equation with diffusion terms. **Physical Review**, v. 104, n. 3, p. 563-565, 1956.

3 COOKE, M.; KALMYKOV, Y. P.; COFFEY, W. T.; KERSEKENS, C. M. Langevin equation approach to diffusion magnetic resonance imaging. **Physical Review E**, v. 80, n. 6, p. 061102-1-061102-12, 2009.

## PG168

# Purificação da enzima alostérica Glucosamina-6-fosfato de *Escherichia coli* para experimentos de Ressonância Magnética Nuclear

SANTOS, V. A. R. dos<sup>1</sup>; HORJALES, E.<sup>2</sup>

valquisan@hotmail.com

<sup>1</sup>UNICEP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O trabalho baseia-se na proteína alostérica glucosamina-6-fosfato desaminase (GlcN6P desaminase) de *Escherichia coli*. A enzima faz parte da via de catabolismo de amino-açúcares e catalisa a desaminação e isomerização de glucosamina-6-fosfato (GlcN6P) em frutose-6-fosfato (Fru6P) e íon amônio.(1) Estruturalmente é uma proteína hexamérica com subunidades idênticas de 266 resíduos em simetria 32 (2), com peso molecular de 178KDa e 29,7KDa cada subunidade (1). O objetivo foi otimização da purificação da proteína a partir de cultura em meio mínimo, para posteriormente expressar a enzima à partir de <sup>13</sup>C e <sup>15</sup>N, o que permitirá medidas de espectros de RMN (3), com técnicas de tempos de relaxação para obter informação sobre as mudanças conformacionais existentes em solução. A metodologia do trabalho consiste na expressão em meio mínimo, de forma a prover a célula apenas de glicose com <sup>13</sup>C e amônio com <sup>15</sup>N, seguidos de técnicas de purificação: precipitação com sulfato de amônio, lise dos ácidos nucleicos, passando por diálise e concluindo com técnicas cromatográficas (troca iônica e gel filtração). A cada etapa foram realizados experimentos de espectrofotometria, utilizando comprimento de onda de  $\lambda = 280\text{nm}$ , absorvido por aminoácidos aromáticos, e considerando o coeficiente de extinção - 0,90mg/(ml.uA) para a Glucosamina-6-fosfato Desaminase. Como resultado da expressão de GlcN6P em meio mínimo obtivemos 19,32mg de proteína por litro de meio de cultura. A quantidade obtida é adequada apesar das perdas, decorrente das várias etapas de purificação, o que nos permite a realização da expressão com isótopos marcados <sup>13</sup>C e <sup>15</sup>N, e a adaptação da célula a D<sub>2</sub>O, permitindo assim a realização de experimentos de RMN.

**Palavras-chave:** Purificação. Otimização da expressão. Meio mínimo.

### Referências:

1 CALCAGNO, M.; CAMPOS, P.J.; MULLIERT, G.; SUISTEGUI, J. Purification, molecular and kinetic properties of glucosamine 6-phosphate isomerase-deaminase from *Escherichia coli*. **Biochimica et Biophysica Acta**, v.787, n.2, p.165-173, June 1984.

2 RUDIÑO-PIÑERA, E.; MORALES-ARRIETA, S.; ROJAS-TREJO, S. P.; HORJALES, E. . Structural flexibility, an essential component of the allosteric activation in *Escherichia coli* glucosamine-6-phosphate deaminase. **Acta Crystallographica D.**, v.58, pt.1, p.10-20, Dec. 2002.



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

3 TUGARINOV, V.; KANELIS, V. ; KAY, L. E. Isotope labeling strategies for the study of high-molecular-weight proteins by solution NMR spectroscopy. **Nature**, v.1, n..2, p.749-754, 2006.

## PG169

### Análise da curvatura como fator de discriminação entre lesões melanocíticas

SBRISSA, D. A.<sup>1</sup>; BAGNATO, V.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>; COSTA, L.<sup>1</sup>; SALVIO, A. G.<sup>2</sup>

sbrissa@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Hospital Amaral Carvalho de Jaú

**INTRODUÇÃO:** O diagnóstico de melanoma em suas fases iniciais é imprescindível para o melhor prognóstico do paciente, porém nesta fase ele pode passar despercebido, principalmente no indivíduo com múltiplos nevos(3). Isso torna importante a diferenciação das lesões melanocíticas. **OBJETIVO:** Apresenta-se um método de análise de imagens baseado na complexidade do contorno das lesões como fator de distinção entre lesões melanocíticas névicas, displásicas e melanoma. **MÉTODOS:**Foram analisadas 39 lesões melanocíticas, sendo 15 melanomas iniciais, 10 nevos juncionais e 14 nevos displásicos. As imagens foram pré-processadas e o contorno foi extraído. Foram calculadas métricas do contorno da lesão as quais foram obtidas baseadas na curvatura desse contorno(1). Foras escolhidas oito métricas consideradas mais relevantes. A separação dos grupos foi determinada por Linear Discriminant Analysis (LDA) e a classificação feita por k-Nearest Neighbors (kNN)(2). **RESULTADOS:** A partir do resultado do LDA, foi obtida uma classificação correta de 75% dos melanomas, 60% dos nevos juncionais e 85% dos nevos atípicos. **DISCUSSÃO:**A partir dos dados apresentados, verifica-se que os dados estatísticos da curvatura e o arranjo entre os picos de cada imagem apresenta adequada separação das classes do LDA. A complexidade da curvatura pode refletir a representação gráfica do crescimento radial, sendo este exuberante no melanoma em fase inicial. **CONCLUSÃO:**A relação entre os picos das lesões é um fator de distinção entre melanoma e nevos, e o aperfeiçoamento deste software poderia contribuir para a triagem inicial de lesões melanocíticas.

**Palavras-chave:** Melanoma. Diagnóstico precoce. Processamento de imagens.

#### Referências:

- 1 COSTA, L da F.; MARCONDES JUNIOR, R. **Shape analysis and classification:** theory and practice. Boca Raton, FL: CRC Press, 2009.
- 2 DUDA, R. O.; HART, P. E.; STORK, D. G. . **Pattern Classification.** New York: Wiley, 2001.
- 3 ISASI, A. G.; ZAPIRAIN, B. G.; ZORRILLA, A. M. Melanomas non-invasive diagnosis application based on the ABCD rule and pattern recognition image processing algorithms. **Computers in Biological and Medicine**, v. 41, n. 9, p. 742-755, 2011.

## PG170

# Estudo de sensibilidade ao alinhamento e desenvolvimento de uma metodologia para alinhamento de sistemas ópticos por meio da análise de aberrações de frente de onda utilizando redes neurais artificiais

SCADUTO, L. C. N.<sup>1</sup>; CASTRO NETO, J. C.<sup>1</sup>

lucimara@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Erros de alinhamento em sistemas ópticos não criam novas aberrações, mas alteram a dependência com o campo das aberrações já conhecidas. (1) Neste trabalho, a sensibilidade ao alinhamento, de sistemas ópticos reflexivos compostos por dois elementos, foi avaliada em função das constantes cônicas dos espelhos. Dentre as diferentes configurações consideradas nesta análise, uma específica apresenta menor sensibilidade à descentralização do espelho secundário. Este comportamento pode ser explicado por meio da teoria de aberrações de onda aplicável a sistemas plano-simétricos. Neste sistema, a escolha apropriada da geometria do espelho secundário faz com que coma uniforme de terceira ordem seja compensado quando esse elemento encontra-se descentralizado, tornando-o menos sensível. (2) Este trabalho apresenta uma metodologia de alinhamento baseada na análise da frente de onda transmitida por sistemas ópticos. A frente de onda transmitida por um sistema óptico carrega informações das aberrações desse sistema, que podem ser descritas em termos dos polinômios de Zernike. (3) A metodologia proposta utiliza redes neurais artificiais para a estimativa dos erros de alinhamento através da análise dos polinômios de Zernike ajustados à frente de onda do sistema. As estimativas teóricas dos desalinhamentos tanto em sistemas reflexivos como em sistemas refrativos são satisfatórias quando o sistema é considerado perfeito, ou seja, as superfícies ópticas de seus elementos não apresentam erros de forma e não há ruído nos dados avaliados. Na presença de defeitos de fabricação ocorre degradação no desempenho do estimador, mas ainda é possível estimar alguns desalinhamentos do sistema quando as imperfeições são conhecidas. Além de descentralização e inclinação, redes neurais artificiais são capazes de fornecer uma estimativa de erros de posicionamento axial entre os elementos do sistema. Com base nos estudos realizados, acredita-se que redes neurais artificiais constituem uma alternativa promissora no alinhamento de sistemas ópticos complexos.

**Palavras-chave:** Alinhamento. Aberrações de frente de onda. Redes neurais artificiais.

### Referências:

- 1 SASIAN, J. M. How to approach the design of a bilateral symmetric optical system. **Optical Engineering**, v. 33, n. 6, p. 2045-2061, 1994.
- 2 SCADUTO, L. C. N.; SASIAN, J.; STEFANI, M. A.; CASTRO NETO, J. C. Two-mirror telescope design with third-order coma insensitive to decenter misalignment. **Optics Express**, v. 21, n. 6, p. 6851-6865, 2013.





SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

3 MAHAJAN, V. N. Zernike circle polynomial and optical aberrations of systems with circular pupils. **Applied Optics**, v. 33, n. 34, p. 8121-8124, 1994. Supplement.

**PG171****SU(2) lattice gluon propagator and potential models**SERENONE, W. M.<sup>1</sup>; CUCCHIERI, A.<sup>1</sup>; MENDES, T.<sup>1</sup>

willian.matioli@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Our present work aims at the study of the spectrum of the bottomonium, a bound state of quark  $b$  with an antiquark  $\bar{b}$ . The system can be described by the Bethe-Salpeter equation. However this is a non-relativistic system, and imposing this approximation on the Bethe-Salpeter equation we obtain the Schrödinger equation. (1) The problem then reduces to find a suitable potential that models the quark-antiquark interaction and solve the Schrödinger equation for this potential. For obtaining the potential we consider a pure SU(2) theory. We discretize this theory in a lattice, associating to each link between sites a gauge field. These fields are initially set to an arbitrary value and then we evolve the system state through a Monte Carlo simulation. On the end, correlation functions are measured to obtain the gluon propagator. Since the propagator is gauge dependent, during the simulation we enforce the Landau gauge is respected. We use SU(2) symmetry instead of the SU(3) because we simulate on large lattices (up to  $128^4$ ) and therefore using the SU(3) symmetry would turn the code too slow. (2) It is possible to show through perturbation theory that a Fourier Transform on the propagator will result on the desired potential. However we lose the non-perturbative approach of the lattice and it is needed to add a linear term on the potential to be able to account for confinement (this linear term is motivated from studies on the lattice). We let the string tension parameter and the bottom mass as a free parameter to be fitted on the spectrum. (3) We proceed by choosing a value for the free parameters and solving numerically the Schrödinger equation. The eigenenergy is obtained by observing the behavior of the wave function at infinity for different energy values. Once we obtain the spectrum for one given parameter value, it is compared to the experimental spectrum. The process is done for several values of the parameters aiming at determining the ones which best describes the observed spectrum. To improve the time required to perform the calculations, this process is parallelized using Mathematica to run the program on a GPU.

**Keywords:** Bottomonium. Potential model. Lattice.**Referências:**

- 1 BERNARDINI, A. E.; DOBRIGKEIT, C. The charmonium and bottomonium mass spectroscopy with a simple approximation of the kinetic term. **Journal of Physical G: nuclear particles physics**, v. 29, n.7, p. 1439-1449, 2003.
- 2 CUCCHIERI, A.; DUDAL, D.; MENDES, T.; VANDERSICKEL, N. Modelling the gluon propagator in Landau Gauge: lattice estimates of pole masses and dimension-two condensates. **Physical Review D**, v. 85, n. 9, p. 094513-1-094513-15, 2012.



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

3 LUCHA, W.; SCHÖBERL, F. F.; GROMES, D. Bound states of quarks. **Physics Reports**, v. 200, n.4, p. 127-240, 1991 .

## PG172

### Caracterização das interações macromoleculares das proteínas envolvidas na síntese de selenocisteínas em *Escherichia coli*

SERRÃO, V. H. B.<sup>1</sup>; PORTUGAL, R. V.<sup>2</sup>; HEEL, M. V.<sup>3</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

vitor.serrao@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNano - CNPEM

<sup>3</sup>Leiden Universiteit

O estudo de processos de tradução do código genético em proteínas desperta o interesse pelo seu papel central no metabolismo celular, em particular, o estudo da via de síntese de novos aminoácidos, como a selenocisteína e a pirrolisina, que resultam na expansão do código genético dos 20 aminoácidos tradicionais para um total de 22 aminoácidos. A selenocisteína (Sec, U) representa a principal forma biológica do elemento selênio e sua incorporação é um processo co-traducional em selenoproteínas como resposta ao códon UGA em fase e requer uma complexa maquinaria molecular. (1) O repertório completo de genes envolvidos na via de síntese desse aminoácido em procariotos é conhecido, porém as interações moleculares entre as diferentes proteínas não é bem caracterizada. Este projeto visa à caracterização molecular e estrutural das interações entre a Selenocisteína Sintase (SelA) e Fator de Elongação específico para selenocisteínas (SelB) com ribossomo em *Escherichia coli*. (2) Para isso, medidas de Anisotropia de Fluorescência e Técnicas de Microcalorimetria serão utilizadas para determinação das constantes de interação desses complexos proteicos. A fim de obter modelos estruturais, serão empregadas técnicas de Microscopia Eletrônica utilizando coloração negativa (*Negative Stain*) Crio-Microscopia Eletrônica de alta resolução (Crio-ME) e Espectrometria de Massa com Troca Hidrogênio/Deutério (H/DEX). (3) Os estudos propostos irão auxiliar no entendimento do mecanismo de incorporação deste aminoácido em bactérias bem como nos demais domínios da vida.

**Palavras-chave:** Selenocisteínas. Complexos macromoleculares. Crio microscopia eletrônica.

#### Referências:

- 1 THANBICHLER, M.; BÖCK, A. Purification and characterization of hexahistidine-tagged elongation factor SelB. **Protein Expression and Purification**, v. 31, n. 2, p. 265-270, Oct. 2003.
- 2 FORCHHAMMER, K.; BÖCK, A. Selenocysteine synthase from *Escherichia coli*. Analysis of the reaction sequence. **Journal of Biological Chemistry**, v. 266, n. 10, p. 6324-6328, Apr. 1991.
- 3 MANZINE, L. R. et al. Assembly stoichiometry of bacterial selenocysteine synthase and SelC (tRNA<sup>Sec</sup>). **FEBS Letters**, v. 587, n. 7, p. 906-911, Apr. 2013.doi: 10.1016/j.febslet.2013.02.014.

## PG173

# Quantum turbulence in a harmonically trapped Bose-Einstein condensate: from vortices to granulation

SHIOZAKI, R. F.<sup>1</sup>; TAVARES, P. E. S.<sup>1</sup>; BAHRAMI, A.<sup>1</sup>; TELLES, G. D.<sup>1</sup>; HENN, E. A. L.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

rfshiozaki@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Although classical turbulence has been studied for many centuries, it still remains one of the most important unsolved problems in classical physics. The large range of scales involved in the problem makes it difficult to handle by both experimental and theoretical means. On the other hand, quantum turbulence (QT) presents a long-range quantum order which poses constraints to its dynamics (quantized vortices) simplifying general studies. QT is a tangled configuration of vortices in a superfluid such as a Bose-Einstein Condensate (BEC). We present experimental studies of a harmonically trapped BEC undergoing oscillatory excitations that can nucleate vortices, and generate QT. First we analyze the vortex nucleation mechanism through ripples formation on the superfluid surface due to a counterflow motion between thermal and condensed components. (1) Then, considering the finite size characteristic of the system, the transition from a non-turbulent vortex regime to a turbulent state is explained in terms of two excitation parameters: amplitude and duration. (2) As these parameters are further increased, a granular state resembling the Bose glass phase is reached. (3)

**Keywords:** Bose-Einstein condensation. Quantum vortices. Quantum turbulence.

### Referências:

- 1 TAVARES, P. E. S. et al. Out of phase oscillation between superfluid and thermal components for a trapped Bose condensate under oscillatory excitation. **Laser Physics Letters**, v. 10, n. 4, p. 045501-1-045501-6, Apr. 2013.
- 2 SHIOZAKI, R. F. et al. Transition to quantum turbulence in finite size superfluids. **Laser Physics Letters**, v. 8, n. 5, p. 393-397, May 2011.
- 3 SEMAN, J. A. et al. Route to turbulence in a trapped Bose-Einstein condensate. **Laser Physics Letters**, v. 8, n. 9, p. 691-696, Sept. 2011.

## PG174

### Protótipo dataflow em FPGA

SILVA JUNIOR, J. T.<sup>1</sup>; RUGGIERO, C. A.<sup>1</sup>

jtsjunior@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a década de 70 existe uma grande discussão acerca do ganho em desempenho de processamento, de forma que ele não pode ser obtido somente com o aumento do *clock* do processador, como vimos acontecer, e o paralelismo é um paradigma muito explorado para esse fim. Diversos sistemas computacionais controlados por dados (*data-driven*) foram analisados a fim de obter esse paralelismo em nível de organização e arquitetura de computadores. A **intel** por exemplo, já possui um processador com 50 núcleos (**Xeon Phi Knights Corner**), talvez uma arquitetura **MIMD** possa ser uma alternativa mais viável para o controle dessa grande quantidade de processadores, ao invés de deixar a cargo do sistema operacional controlá-los, como vem sendo feito na arquitetura **Von Neumann** utilizada. O *Dataflow* é uma técnica para sistemas computacionais controlado por dados, para especificar programas em um grafo bidimensional: Instruções que podem ser executadas paralelamente são dispostas lado-a-lado e instruções que devem ser executadas sequencialmente são dispostas uma abaixo da outra. (1) O objetivo desse trabalho é a criação de um protótipo que siga as diretrizes do protótipo *Dataflow* de **Manchester** com a utilização de **FPGA** (sistema para hardware reconfigurável a partir do rearranjo de portas lógicas). Esse modelo *Dataflow* é baseado em um sistema dinâmico, ou seja, o rótulo de cada ficha (conjunto que armazena todas as informações de um determinado dado) possui um nome de ativação único, essa característica que permite a realização de laços e recursividade nesse modelo. (2) O protótipo *Dataflow* de **Manchester** é caracterizado por sua grande modularidade sendo composto por 5 módulos principais, sendo eles: Fila de Fichas (unidade de *buffer*), Unidade de Emparelhamento (emparelhamento de fichas destinadas a mesma instrução), Unidade de Sobrecarga (alocação de fichas que aguardam emparelhamento), Unidade de Instruções (armazenamento do código do programa em execução) e Unidade de Processamento (armazena as unidades funcionais que compõe o sistema). (3) O projeto prevê a implementação da Unidade de Emparelhamento para a realização de testes de desempenho através de uma interface de comunicação com simuladores desse protótipo, seguido pelo desenvolvimento das outras unidades. Todo o desenvolvimento será realizado com a utilização de **FPGA** através de linguagem **Bluespec System Verilog**.

**Palavras-chave:** Dataflow. FPGA. Protótipo de Manchester.

#### Referências:

- 1 GURD, J. R.; KIRKHAM, C. C.; WATSON, I. The Manchester prototype dataflow computer. **Communications of the ACM**, v. 28, n. 1, p. 34- 52, Jan. 1985.
- 2 SHARP, J. A. **Dataflow computing**: theory and practice. New York: Ablex Publishing Company, 1992.



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

3 KIRKHAM, C. C. **The Manchester prototype dataflow system - basic programming**. 6nd. ed. Manchester:UMC-DF-BPM,1987. Manual.

## PG175

### Terapia fotodinamica no tratamento das micoses superficiais

SILVA, A. P. da<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; INADA, N. M.<sup>1</sup>

paulalsir@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de Sao Carlos - USP

As micoses são doenças produzidas por um grupo de fungos que atingem a pele, o tecido celular subcutâneo e em poucos casos pode atingir órgãos internos. Estas doenças tornaram-se um problema de saúde publica dos países da America Latina e outros países com áreas subtropicais.(1) Neste grupo, as mais observadas no Brasil estão, a cromoblastomicose, lobomicose (lacaziose), esporotricose, micetomas. Fazem parte ainda desse grupo a rinosporidiose e as zigomicoses, doença em geral de imunossuprimidos. (2)A cromoblastomicose pode ser considerada uma doença endêmica em regiões como a Amazônia e Maranhão sendo esta micose de difícil tratamento pela escassez de antifúngicos eficazes, o tempo prolongado de tratamento e a alta taxa de recidiva aos tratamentos atuais. A lobomicose é encontrada quase que exclusivamente na Região Amazônica, e caracteriza-se por lesões nodulares na pele, causadas pelo fungo *Lacazia loboi*. A doença é crônica e ainda não há uma droga específica para o seu tratamento.(1-2) As demais doenças um pouco menos frequentes são consideradas de difícil tratamento. Diante deste contexto, novas tecnologias precisam ser testadas. A TFD é uma técnica relativamente nova que esta sendo usada para controle microbiológico de diferentes agentes bacterianos, parasitários, virais e fúngicos. Três elementos são fundamentais na TFD: a presença do fotossensibilizador, a molécula que absorve luz para desencadear uma série de reações fotoquímicas; a luz em um comprimento de onda específico, e o oxigênio presente nos fungos, a junção destes três elementos geram uma serie de elementos altamente reativos como oxigênio singleto que oxidam as diferentes estruturas levando a morte o fungo. Pretende-se neste trabalho avaliar a resposta das micoses subcutâneas ao tratamento com TFD tópica usando metil aminolevulinato tópico (MAL) e curcumina e luz num comprimento de onda adequado. Será avaliada também, a resposta imunológica das lesões ao tratamento. Dessa maneira, o estudo contribuirá ao conhecimento da eficácia da técnica como tratamento destas infecções fúngicas e a resposta imune à mesma.(3)

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Micoses. Micro-organismos.

#### Referências:

- 1 DOUGHERTY, T.J. et al. Photoradiation therapy for the treatment of malignant tumors. . **Cancer Research**, v.38, n.8, p. 2628-35, 1978.
- 2 ISSA, M.C.A.; MANELA-AZULAY, M. Photodynamic therapy: a review of the literature and image documentation. **Anais Brasileiros de Dermatologia**, v.85, n.4, p. 501-11, 2010.
- 3 TOREZAN, L.; NIWA, A.B.M.; FESTA NETO, C. erapia fotodinâmica em dermatologia: princípios básicos e aplicações. . **Anais Brasileiros de Dermatologia**, v.84, n.5,p;445-59, 2009.



## PG176

### 5-fluorocytosine: towards the salt formation

SILVA, C. C. P.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, R.<sup>1</sup>; AYALA, A. P.<sup>2</sup>; HONORATO, S. B.<sup>2</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>

cecycarol@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Departamento de Física - UFC

5-fluorocytosine (5-FC) is an antimetabolite widely used as an antifungal agent. It acts by being deaminated into 5-fluorouracil (5-FU). The deamination is performed by the enzyme cytosine deaminase (CD) present in the fungal cells. 5-FU is a potent, but highly toxic, antineoplastic agent used for cancer treatment. In 1985, 5-FC was introduced by gene-directed enzyme prodrug therapy (GDEPT) for cancer treatment.<sup>(1)</sup> Although 5-FC tends to be basic ( $pK_a = 3.26$ ), only three salts were reported, a salicylate and two chloride monohydrate.<sup>(2-3)</sup> In an effort to contribute with the salt formation study and to provide information helpful towards the comprehension of its supramolecularity, which may help in the comprehension of its drug/receptor interaction and in its use in specific crystal engineering studies, we crystallized three new salts of 5-FC, with dicarboxylic acids: oxalic, maleic and fumaric ones. All the new salts crystallize in the monoclinic space group P21/c. In the 5-FC oxalate and fumarate cases, the acid molecules are placed on an inversion center, in a fashion that each half molecule exhibits one terminal donor/acceptor site leading to the constitution of a 5-FC/acid/5-FC heterodimer. Such a heterodimer is observed in only one donor/acceptor site of the maleate of 5-FC, whose acid molecule exhibits a closed chain architecture. However the main motif is similar in all the new salts and is assembled via complementary N41 - H41A ... O4 and N3+ - H3 ... O3- hydrogen bonds between the 5-FC molecule and the acid one. Infrared and Raman spectra recorded for the three compounds complement the salt characterization on the basis of the extent of proton transfer. Thermal analysis shows that the salt formation decreases the melting point of the new compounds, qualifying this molecule as an interesting co-former candidate to improve the physical properties of other active pharmaceutical ingredients.

**Keywords:** Solid state . Crystallography. Antineoplastic drugs.

#### Referências:

1 VERMES, A.; GUCHELAAR, H.-J.; DANKERT, J. Flucytosine: a review of its pharmacology, clinical indications, pharmacokinetics, toxicity and drug interactions. **Journal of Antimicrobial Chemotherapy**, v. 46, n. 2, p. 171-179, 2000.

2 PRABAKARAN, P.; MURUGESAN, S.; MUTHIAH, P.T.; BOCELLI, G.; RIGHI, L. Intermolecular N-H O hydrogen-bonding interactions in 5-fluorocytosinium salicylate. **Acta Crystallographica E**: structure report online, v.57, n.10, o933-o936, 2001.

3 PORTALONE, G.; COLAPIETRO, M. Asymmetric base pairing in the complex 5-fluorocytosinium chloride/5-fluorocytosine monohydrate. **Journal of Chemical Crystallography**, v. 37, n.2, p. 141-145, 2007.

## PG177

### KBDM: Um novo método para processamento de sinais de MRS

SILVA, C. M. P.<sup>1</sup>; TANNUS, A.<sup>1</sup>

cintia.maira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

In this study, we propose the use of the Krylov Basis Diagonalization Method (KBDM) formalism as an alternative to the Fourier Transform (FT) to process Magnetic Resonance Spectroscopy (MRS) data. KBDM is numerically more effective for the analysis of truncated signals and resourceful which allows to remove more efficiently peaks, such as residual water peak (1). As preliminary results, the formalism was evaluated using a phantom which simulated a biochemical human brain with respect to the molar concentration relations of the metabolites (2). With a no loss of resolution, we could truncate the signal in 4% of its original size, in addition to effectively remove residual water peak. Exciting prospects from this work include the introduction of KBDM as an efficient and adjuvant technique to functional Magnetic Resonance Imaging (fMRI), for studying the brain functions, in MRS sequence to identify rapid variation in spectroscopic lines associated to metabolic activities (3) in the brain.

**Palavras-chave:** KBDM. Espectroscopia por ressonância magnética. Processamento de sinais.

#### Referências:

- 1 MANDELSHTAM, V. A. FDM: the filter diagonalization method for data processing in NMR experiments . **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 38, n. 2, p. 159-196.
- 2 POUWELS, P. J. W.; FRAHM, J. Regional metabolite concentrations in human brain as determined by quantitative localized proton MRS. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 39, n. 1, p. 53-60.
- 3 GOVINDARAJU, V.; YOUNG, K.; MAUDSLEY, A. A. Proton NMR chemical shifts and coupling constants for brain metabolites . **NMR in Biomedicine**, v. 13, n. 3, p. 129-153.

## PG178

### **Ferramentas multiplataforma para aquisição, organização, processamento e visualização de dados em espectrômetro digital de RM**

SILVA, D. M. D. D.<sup>1</sup>; PIZETTA, D. C.<sup>1</sup>; COELHO, F. B.<sup>1</sup>; LOURENÇO, G. V.<sup>1</sup>; FREIRE, G. M.<sup>1</sup>; MARTINS, M. J.<sup>1</sup>; VIDOTO, E. L. G.<sup>1</sup>; TANNÚS, A.<sup>1</sup>

danilomendes@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A técnica de ressonância magnética, por não ser destrutiva ou invasiva, possui papel importante em diversas áreas. No entanto, estudos sobre a difusão e incorporação da tecnologia de ressonância magnética no Brasil demonstraram que a participação do país é consideravelmente baixa em relação aos países desenvolvidos. (1) Neste sentido, trabalhos estão sendo desenvolvidos no CIERMag, para a criação de um tomógrafo completamente digital de ressonância magnética (Projeto ToRM15), com concepção completa e proprietária do grupo. A substituição da eletrônica convencional pela utilização de FPGAs, além da elaboração de uma linguagem própria para criação de sequências de pulsos e ambiente de desenvolvimento para a mesma são características fundamentais deste projeto. (2-3) Este trabalho tem por finalidade descrever duas aplicações que fazem parte deste projeto, o ToRM Console e o ToRM Processing, a última em fase de concepção e desenvolvimento. O ToRM Console é o sistema responsável por prover uma interface espectrômetro-usuário e permite utilizar as metodologias de sequência de pulsos previamente desenvolvidas na realização de um experimento. O ToRM Processing é uma ferramenta de pós-processamento e visualização dos dados adquiridos pelo espectrômetro que pode ser integrada ao ToRM Console, além de permitir a automatização de tarefas de processamento. Ambas as ferramentas foram desenvolvidas em linguagem de programação Python com auxílio das bibliotecas PySide, NumPy, SciPy, entre outras. O ToRM Console permite o carregamento de uma metodologia de sequência de pulsos, alterações e validação de valores de parâmetros de metodologia e de sistema, além da aquisição, pré-processamento e organização dos dados adquiridos pelo espectrômetro. O sistema de aquisição é baseado numa arquitetura cliente-servidor, de maneira que a comunicação entre o espectrômetro e o ToRM Console é feita por intermediação de uma aplicação que se comunica diretamente com o hardware, o ACQServer, através de um protocolo FTP alterado. Em tempo de execução, são aplicados filtros FIR passa-baixa nos dados adquiridos utilizando-se uma frequência de corte informada pelo operador através de um parâmetro. O uso dos filtros permite a remoção de ruído de frequência superior à frequência de corte e, obedecendo o critério de Nyquist, a redução do número de pontos sem perda de informação. A organização dos dados é feita de maneira automatizada, levando em consideração algumas características da estrutura da metodologia como, por exemplo, o uso de médias, a ordem de recebimento dos dados, etc. Através de protocolos e scripts de pós-processamento, criados pelo desenvolvedor da metodologia, é possível automatizar operações sobre os dados adquiridos para, por exemplo, a exibição de uma imagem em uma metodologia de MRI, gerada pela aplicação de transformadas de Fourier. Esta tarefa pode ser realizada pelo ToRM Processing, que utiliza a biblioteca gráfica PyQtGraph para permitir a visualização em 2D e 3D. O desenvolvedor da metodologia possui acesso a uma API que oferece acesso aos dados, ferramentas para visualização e outros elementos que facilitam o desenvolvimento do script

de pós-processamento. Agradecemos ao CIERMag, além das agências de fomento tecnológico pelo apoio ao projeto (FAPESP: 2005/5.6663-1 e CNPQ: 565.047/2010-8, CAPES, FINEP, FNS).

**Palavras-chave:** Ressonância magnética. Desenvolvimento de software. Instrumentação.

### Referências:

- 1 ANDRADE, E. I. G. et al. Análise da evolução do conhecimento e da difusão e incorporação da tecnologia de ressonância magnética no Brasil. In: ANNUAL MEETING HEALTH TECHNOLOGY ASSESSMENT INTERNATIONAL, 2005, Barcelona. **Proceedings...** Barcelona, 2005. 4 p.
- 2 COELHO, F. B.; MARTINS, M. J.; TANNUS, A.; VIDOTO, E. L. G. Domain specific language for magnetic resonance sequence programming on a digital spectrometer. In: WORKSHOP COOPERAÇÃO INTERINSTITUCIONAL DE APOIO A PESQUISA SOBRE O CEREBRO, 5., 2011, São Paulo. **Resumos...** São Paulo: 2011.
- 3 PIZETTA, D. C.; SILVA, D. M. D. D. ; LOURENÇO, G. V.; FREIRE, G. M.; COELHO, F. B.; MARTINS, M. J.; VIDOTO, E. L. G.; TANNUS, A. Desenvolvimento de API e IDE para criação, validação e gerenciamento metodologias em ressonância magnética. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA BIOMÉDICA - CBEB, 23., 2012, Porto de Galinhas. **Anais...** Rio de Janeiro: Sociedade Brasileira de Engenharia Biomédica - SBEB, 2012. p. 1631-1633.

## PG179

### Estudos estruturais e bioquímicos sobre os receptores CHASE bacterianos associados a domínios GGDEF/EAL

SILVA, E. E. D.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

everton.edesio@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A assimilação da forma colonial bacteriana (biofilme) ou da livre nadante é controlada pelos níveis intracelulares do nucleotídeo c-di-GMP que, por sua vez, são promovidos ou atenuados pela ação dos domínios proteicos GGDEF e EAL, respectivamente. (1) Estes domínios são encontrados compartilhando a mesma sequência proteica com seus diferentes reguladores, dentre os quais os recentemente determinados CHASE. (2) Estas proteínas compostas por CHASE e os domínios envolvidos no metabolismo intracelular do c-di-GMP são o alvo do presente estudo. CHASE é a abreviação decorrente da primeira classificação do domínio, na qual domínios ciclase e histidino quinase foram constatados associados a este sensor. Na grande maioria das ocorrências é intercalado por regiões transmembrana e, apesar de serem encontrados de organismos inferiores (bactérias) a organismos superiores (plantas), muito pouco é conhecido sobre eles e, em especial, sobre os bacterianos. A fim de buscar esclarecer a rota de sinalização desencadeada pelos domínios CHASE bacterianos, serão estudados os domínios CHASE das microrganismos *Pseudomonas aeruginosa*, importante patógeno humano de pacientes com sistema imune debilitado, e *Xanthomonas axonopodis pv citri*, relevante fitopatógeno de frutos cítricos. Ambas destas bactérias são detentoras tanto do CHASE3 e do CHASE4. No desenvolvimento do trabalho se irá buscar produzir as proteínas por método heterólogo a fim de realizar ensaios in vitro e aplicar técnicas em cristalografia de biomoléculas. Através de análises de bioinformática já foi observado a conservação dos resíduos de aminoácido importantes para catálise dos domínios da via do c-di-GMP e, portanto, um dos objetivos dos experimentos em laboratório é o de verificar se isso reflete de fato na atividade das proteínas. Até o momento, três proteínas inteiras do projeto, XAC1345 e XAC1488 (de *X. axonopodis*) e PA14\_53310 (de *P. aeruginosa*) foram clonadas no vetor pET29, que foi escolhido devido a menor interferência negativa na produção da proteína de membrana. A etapa a qual está em processo de execução é focada em obter proteínas com maior solubilidade, (uma vez que tratam-se de proteínas com regiões transmembrana) e ainda é voltada à estudar os domínios isolados. Para isso, decidiu-se realizar a clonagem de diferentes construções das proteínas e utilizando outro vetor, o pETSUMO, plasmídeo que permite a produção da proteína em fusão com a proteína SUMO, método conhecido por melhorar a solubilidade de proteínas. (3)

**Palavras-chave:** Biofilme. c-di-GMP. CHASE.

#### Referências:

1 SONDERMANN, H.; SHIKUMA, N. J.; YILDIZ, F. H. You've come a long way: c-di-GMP signaling. **Current Opinion in Microbiology**, v. 15, n. 2, p. 140-146, Apr. 2012.

2 ZHULIN, I. B.; NIKOLSKAYA, A. N.; GALPERIN, M. Y. Common extracellular sensory domains in transmembrane receptors for diverse signal transduction pathways in Bacteria and Archaea. **Journal of Bacteriology**, v. 185, n. 1, p. 285-294, Jan. 2003.

3 BUTT, T. R. et al. SUMO fusion technology for difficult-to-express proteins. **Protein Expression and Purification**, v. 43, n. 1, p. 1-9, Sept. 2005.

## PG180

### Redes complexas multidimensionais

SILVA, F. N.<sup>1</sup>; COSTA, L. F.<sup>1</sup>

filipinascimento@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Rede complexas (1) são uma forma de representação de sistemas complexos onde as interações entre elementos tem um papel fundamental para sua descrição. Recentemente, estudos em redes complexas apresentaram grande potencial para entender a estrutura e dinâmica de sistemas em diferentes áreas do conhecimento. Uma rede complexa é composta por um conjunto de vértices e arestas. Vértices podem representar elementos como partículas, pessoas e proteínas; enquanto arestas, podem representar as conexões ou relações entre eles, como a interação entre partículas, a amizade entre pessoas e semelhança entre proteínas. A obtenção de modelos quantitativos que representem fenômenos reais, observados na natureza, assim como o desenvolvimento de metodologias de caracterização de redes complexas, tornaram-se essenciais para a compreensão e desenvolvimento de pesquisas com essas estruturas. A estrutura topológica de certas redes pode estar acoplada a informações geográficas ou espaciais inerentes do fenômeno ou modelo estudado. Essas redes são chamadas de redes geográficas ou redes espaciais, onde a distancia euclidiana entre vértices possui papel fundamental na descrição de suas conexões. Redes geográficas baseadas em transporte podem fornecer informações quantitativas importantes sobre planejamento urbano. Apesar da maioria das redes espaciais estudadas serem geográficas bidimensionais, redes tridimensionais podem ser obtidas através da análise da estrutura inerente de canais em sólidos. Redes espaciais reais com dimensão maior do que 3 foram pouco exploradas como redes geográficas. Um exemplo dessa classe de redes são redes de paisagens de energia potencial (Energy Landscapes). (2) Estas redes descrevem a estrutura topológica intrínseca de mínimos na hiper-superfície gerada por um potencial de energia n-dimensional e podem ajudar a entender melhor os mecanismos complexos que levam à minimização de energia em diferentes sistemas físicos, como dobramento de proteínas, dinâmica nuclear e descrição de potenciais quânticos. Assim como paisagens de energia, paisagens de aptidão (Fitness Landscapes) são superfícies n-dimensionais, entretanto mapeiam uma pontuação de fitness para cada variável de sistema. Nestes sistemas, deseja-se maximizar o score, diferentemente de superfícies de energia, onde o sistema tende a minimizar a energia. Paisagens de aptidão podem ser usadas para entender a evolução de uma população com relação a uma característica, em biologia, por exemplo, o sistema pode ser descrito por genótipos e fenótipos. A proposta deste trabalho é explorar as possibilidades de estudo de redes complexas geográficas de dimensionalidade arbitrária, e, inicialmente, estudar a aplicação de novas metodologias para a análise de redes de potencial. Dada a importância de otimização em diferentes áreas do conhecimento, redes de potencial podem ser úteis para descobrir estratégias de solução para problemas que minimizem ou maximizem uma função de energia. A estrutura topológica de redes geográficas também deverá ser estudada, tendo como maior contribuição apresentar o conceito de dimensionalidade (3) local para vértices. Metodologias de visualização computacional também deverão ser aplicadas às redes, tendo como objetivo tanto validar os novos método como também permitir que dados multidimensionais sejam apresentados em baixas dimensões. Como objetivo final, este trabalho deverá motivar estudos futuros de redes com alta dimensionalidade destacando as



possíveis aplicações e importância.

**Palavras-chave:** Redes complexas. Redes geográficas. Dimensionalidade.

**Referências:**

1 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **SIAM Review**, v. 45, n. 2, p. 167-256, 2003.

2 MASSEN, C. P.; DOYE, J. P. K. Power-law distributions for the areas of the basins of attraction on a potential energy landscape. **Physical Review E**, v. 75, n. 3, p. 037101-1-037101-4, 2007.

3 DAQING, L.; KOSMIDIS, K.; BUNDE, A.; HAVLIN, S. Dimension of spatially embedded networks. **Nature Physics**, v. 7, n. 6, p. 481-484, 2011.

## PG181

### Theory and applications of general quantum correlations in nuclear magnetic resonance systems

SILVA, I. A.<sup>1</sup>; PINTO, D. O. S.<sup>1</sup>; AZEVEDO, E. R.<sup>1</sup>

isa.almeidasilva@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The quantum properties of physical systems as electrons, nucleus and light packages can be exploited to enable advances in information and communication technologies. Because of that a study of the quantum technology is necessary and is being developed in the last decades. The entanglement certainly implies an important role in this context, but many important results were also obtained using separable states (no entangled), some of them based upon General Quantum Correlations (GQCs). Among the GQCs quantifiers, the different formulations for the quantum discord, e.g. entropic discord, geometric discord and negativity of quantumness, have been recognized as excellent tools for quantifying GQCs as well as to follow their behavior under decoherence. In this context, it become very important to develop and validate the measuring criteria for the GQCs. To do so we propose Nuclear Magnetic Resonance (NMR) techniques that allow to implement a set of two-qubit quantum states based on two spins  $1/2$  coupled by  $J$  scalar coupling and a spin  $3/2$  quadrupolar nucleus as well as to monitor the behavior of the aforementioned GQCs quantifiers under decoherence. Besides both spin systems can be used as a representation of two qubit systems, each of them behave differently under decoherence, being coupled to the environment by distinct phase damping channels. These different channels allow us to observe some interesting properties, and different behaviors of the GQCs quantifiers in each of them. For Bell diagonal states, we experimentally investigate the influence of the initial state in the decoherence behavior, presenting the first experimental observation of the freezing of the geometric quantum discord (1) and the double sudden-change in the behavior of quantum discord when quantified by the negativity of quantumness. Based on those results, we inquired about the universality of the observed behaviors over all GQCs quantifiers. Thus, in a new project, which the highlights will also be presented, we are interested in experimentally observing the universality of the freezing phenomenon as recently proposed in a theoretical study. (2) We intend to developed some NMR techniques which can improve our experimental results, for instance, to use the method named of GRadiant Ascent Pulses Engineering (GRAPE), which allow to correct for the relaxation effects during the state preparation, and also to perfect a method that we recently developed that provides a direct measurement of the GQCs quantifiers without the need of quantum state tomography. (1) Our final objective is to experimentally demonstrate a purification protocol, which allows us to transfer part of the mixture characteristic of a system to some *trash* system. (3) It has been demonstrated that how a system can be purified depends on the initial state. Because of that, besides experimentally demonstrate the protocol it is also intended to investigate the necessary condition over initial states in the context of NMR systems.

**Keywords:** Quantum information. Quantum discord. Nuclear magnetic resonance.

**Referências:**

1 SILVA, I. A.; GIROLAMI, D.; AUCCAISE, R.; SARTHOUR, R. S.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J.; DEAZEVEDO, E. R.; SOARES-PINTO, D. O.; ADESSO, G. Measuring bipartite quantum correlations of an unknown state. **Physical Review Letters**, v. 110, n.14, p.140501-1-140501-6, 2013.

2 AARONSON, B.; LOFRANCO, R.; ADESSO, G. Comparative investigation of the freezing phenomena for quantum correlations under nondissipative decoherence. **Physical Review A**, v. 88, n.1, p. 012120-1-012120-7, 2013.

3 DIFRANCO, C.; PATERNOSTRO, M. A no-go result on the purification of quantum states. **Scientific Reports**, v. 3, n. 0, p.1387-1-1387-5, 2013.

## PG182

### Electron paramagnetic resonance of monomeric and dimeric copper complexes

SILVA, I. D. A.<sup>1</sup>; DONOSO, J. P.<sup>1</sup>; MAGON, C. J.<sup>1</sup>; NASCIMENTO, O. R.<sup>1</sup>; MATTO, S. R. I.<sup>2</sup>; ETCHEVERRY, S. B.<sup>3</sup>

idas.fisica@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos - USP

<sup>3</sup>Universidad de La Plata - Argentina

Transition metal ions have been widely studied with electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy techniques. The copper ion, Cu(II), is one of the most studied among them because copper complexes have a wide variety of applications. These complexes can be classified in two groups: The monomeric complexes (when there is no Cu-Cu interaction) and the dimeric complexes (when the Cu-Cu interaction exists). On this research, the following copper complexes were studied: chitosan-based bio-membranes, blends with gelatin, chitosan and agar (all monomeric complexes), which all have technological and environmental applications (1), and the complex  $[Cu_2(sant)_4(H_2O)_2] \cdot 2.5H_2O$  (a dimeric complex), which has application in pharmaceuticals. (2) The research aims are to study the symmetry of the paramagnetic sites in the monomeric complexes and to study the exchange and the dipolar interactions between the copper ions in the dimeric complex. The EPR techniques have been used successfully for both kinds of studies since they can provide local information about the paramagnetic center, the magnitude and anisotropy of the dipolar interaction and the value of the exchange coupling constant  $J_0$ . The X-Band (9.5 GHz) EPR spectra of the monomeric samples were measured in a Bruker-Elexis spectrometer at 50K. These spectra show a typical behavior of Cu(II) ions in axial symmetry (1) and they were analyzed using the Easy-spin package for Matlab to obtain the Spin-Hamiltonian parameters. The Q-band (34.5GHz) EPR spectra of the dimeric sample were measured in room temperature in a Varian E-110 spectrometer. The crystal was oriented in a KCl base and, for the three crystalline planes, the angle between the applied magnetic field and the crystal axes was varied. These spectra present a typical behavior of Cu(II) ions in axial symmetry. (3) Also, the spectra present four lines in the high field region which is consistent with the presence of two non-equivalent dimeric units in the sample. (3) These results were also analyzed with the Easy-spin package for Matlab. All the results are consistent with the results found in the literature. (1,3) Partial support of Capes and CNPq are gratefully acknowledged. This work is also part of the São Paulo Research Foundation program Center for Research, Technology and Education in Vitreous Materials (Fapesp, grant 2013/07793-6).

**Keywords:** Electron paramagnetic resonance. Copper monomeric complexes. Copper dimeric complexes.

#### Referências:

- 1 PAWLICKA, A.; MATTOS, R. I.; TAMBELLI, C. E.; SILVA, I. D. A.; MAGON, C. J.; DONOSO, J. P. Magnetic resonance study of chitosan bio-membranes with proton conductivity properties. **Journal of Membrane Science**, v. 429, p. 190-196, Feb. 2013. doi: 10.1016/j.memsci.2012.11.048.
- 2 WILLIAMS, P. A. M.; ZINCZUK, J.; BARRIO, D. A.; PIRO, O. E.; NASCIMENTO, O. R.; ETCHEVERRY, S. B. Potential antitumoral properties of a new copper complex with santonic acid. **Bioorganics and Medicinal Chemistry**, v. 16, n. 8, p. 4313-4322, Abr. 2008.
- 3 NAPOLITANO, L. M. B. **Estudos através da técnica de ressonância paramagnética eletrônica, em bandas X e Q, dos compostos dinucleares  $Cu_2(TzTs)_4$  e  $[Cu(flu)_2DMF]_2$** . 2009. 103 p. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

## PG183

### Quantum plasmonic interaction: emission enhancement of Er 3+ - Tm 3+ co-doped tellurite glass via tuning nanobowtie

SILVA, O. B.<sup>1</sup>; RIVERA, V. A. G.<sup>1</sup>; FERRI, F. A.<sup>1</sup>; LEDEMI, Y.<sup>2</sup>; ZANATTA, A. R.<sup>1</sup>; MESSADDEQ, Y.<sup>2</sup>; MAREGA JUNIOR, E.<sup>1</sup>

otavio@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Centre d'optique, photonique et laser - Université Laval - Quebec - Canada

Metallic nanobowtie is well known as a suitable structure for development of antennas that can be integrated on wide number of devices, especially in optical communications. Such feature is achieved due presence of surface plasmon polariton (SPP) that provides a great charge density on nearby region from its tips. Considerable studies have described theoretical and experimentally the influence of gap between tips on radiation emission (1), once this parameter may improve the local field, as such length decrease. In optical regime, the emission enhancement is due the quantum-plasmonic interaction created from tip's region (localized field) and the transition levels from rare earth ions of Erbium (Er 3+) and Thulium (Tm 3+). However, metallic nanobowtie with absence of gap still deserve attention, because in addition to present similar properties from angular case as previously mentioned, can also interacts with different systems, like gain materials, that can be embedded thermally into the substrate. Rare earth ion is one of the remarkable and suitable for our proposition, not only for the enhancement on measured intensity (2), but also its easiness to implement it on glasses, which constitute the main type of substrate adopted on plasmonic structures. (3) In this work we performed the analysis of effects due implementation of Er 3+ and Tm 3+ ions into BK7 glass over a pattern of nanobowtie on absence of gap between its tips, fabricated by focused ion beam (FIB) technique from gold (Au) films. The bowties were vertically excited by an Argon (Ar) which wavelength ( $\lambda$ ) was 488 nm. Furthermore, computational simulations based on finite element method (FEM), were performed to verify the dependence of nanobowtie's geometry over the electric field along its symmetry axis.

**Keywords:** Metallic nanobowtie. Localized surface plasmon resonance. Rare earth ion.

#### Referências:

- 1 BI, G. et al. Optical properties of gold nano-bowtie structures. **Optics Communications**, v. 294, p. 213-217, May 2013. doi:10.1016/j.optcom.2012.12.080.
- 2 RIVERA, V. A. G. et al. Efficient plasmonic coupling between Er 3+ (Ag/Au) in tellurite glass. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 358, n. 2, p. 399-405, Jan. 2012.
- 3 RIVERA, V. A. G. et al. Tunable plasmon resonance modes on gold nanoparticles in Er 3+ doped germanium-tellurite glass. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 378, p. 126-134, Oct. 2013.



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

doi:10.1016/j.jnoncrysol.2013.07.004.

## PG184

### **Aplicação da Ressonância Magnética Nuclear para o estudo de líquidos em meios porosos**

SILVA, R. de O.<sup>1</sup>; SOUZA, A. A. de<sup>2</sup>; AMORIM, A. D. F. de<sup>1</sup>; VIDOTO, E. L. G.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

rsilv@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Schlumberger Brazil Research & Geoengineering Center

O estudo do comportamento de fluidos no interior de meios porosos é uma área de pesquisa explorada pela indústria petrolífera para auxiliar na determinação da produtividade e delineamento das estratégias de exploração de reservatórios. Dentre as ferramentas utilizadas para medir as propriedades físicas dos meios porosos e seus líquidos saturantes, destaca-se a Ressonância Magnética Nuclear (RMN). A utilização da RMN tem um papel importante pois, através de alguns métodos, permite estimar a porosidade, tamanho de poros, tortuosidade e permeabilidade do meio poroso, bem como a quantidade e qualidade de seus fluidos saturantes.(1) Um outro aspecto interessante está no fato de que os mesmos experimentos efetuados nos poços, durante sua perfuração, podem ser reproduzidos em laboratório, onde as condições de pressão e temperatura podem se assemelhar tanto quanto se queira às condições dos poços. Num meio poroso saturado por um fluido, impurezas paramagnéticas presentes dentro da matriz rochosa ou na interface líquido/sólido podem ter valores de suscetibilidade magnética muito diferentes dos valores de susceptibilidade do líquido. Quando este sistema é colocado na presença de um campo magnético externo estático, para se efetuar as medidas de RMN, esta diferença na suscetibilidade magnética pode provocar uma inomogeneidade de campo magnético local significativa, e os spins que estão nas moléculas do fluido podem difundir por todo o espaço poroso, sofrendo a ação de diferentes campos magnéticos, alterando seu tempo de relaxação.(2) Desta maneira, o conhecimento da composição das rochas se torna importante para melhor entendimento dos resultados dos experimentos de RMN. Para isso, pode-se utilizar a Análise Petrográfica de Lâmina Delgada (PLD), Fluorescência de Raios-X por Energia Dispersiva (XRF), Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) e medidas de Suscetibilidade Magnética (SM). Este projeto de doutorado foi proposto com intuito de desenvolver e aplicar técnicas de relaxometria por RMN na escala de laboratório. Primeiramente, estudando rochas modelo diversificadas que se assemelham às rochas reservatório, e posteriormente, utilizando as mesmas metodologias para o estudo de amostras de diferentes rochas sedimentares brasileiras, correlacionando os resultados de RMN com a composição das rochas obtidos pelas outras técnicas citadas acima. Os experimentos de RMN utilizados neste trabalho envolvem as medidas dos tempos de relaxação longitudinal ( $T_1$ ) e relaxação transversal ( $T_2$ ), medidas do coeficiente de difusão ( $D$ ) e suas correlações bi-dimensionais  $T_1 \times T_2$ ,  $T_2 \times T_2$  e  $D \times T_2$ , em dois campos magnéticos distintos 0,0620 T e 2 T, evidenciando a dependência das medidas com o campo magnético estático externo devido à diferenças de suscetibilidade magnéticas do meio poroso(3). Com o auxílio destas medidas é possível estimar a porosidade, tamanhos de poros, variação de mecanismos de relaxação da magnetização, conectividade e tortuosidade dos meios porosos, além disso, é possível distinguir diferentes fluidos e estimar seus coeficientes de difusão e suas quantidades.



Neste trabalho apresentamos as técnicas de RMN que estão sendo utilizadas neste projeto de doutorado e os resultados obtidos com as medidas em rochas saturadas com água.

**Palavras-chave:** RMN em meios porosos. Meios porosos. RMN em rochas.

#### **Referências:**

1 DUNN, K.-.; BERGMAN, D.J.; LATORRACA, G.A. **Handbook of geophysical exploration**: nuclear magnetic resonance: petrophysical and logging applications. Oxford: Elsevier Science Ltd., 2002.

2 SUN, B.; DUNN, K.-J. Probing the internal field gradients of porous media. **Physical Review E**, v. 65, n. 5, p.051309, 2002.

3 SONG, Y. Q. Magnetic resonance of porous media (MRPM): a perspective. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 229, p. 12-24, 2012.doi:10.1016/j.jmr.2012.11.010.

## PG185

### Structural determination of TASV-A, a *Trypanosoma cruzi* protein member of the TcTASV family.

SILVA, R. M. A. A.<sup>1</sup>; HORJALES, E.<sup>1</sup>; MUNTE, C. E.<sup>1</sup>

rosanna.silva@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The *Trypanosoma cruzi*, a kinetoplastid protozoan, is the parasite that causes Chagas disease. This chronic condition affects about 8 million people in Latin America and its more aggressive forms can cause death. (1) Currently there is still no suitable treatment or vaccine for this disease; therefore a research effort is required in this field of study. (2) The description of *T. cruzi*'s proteins, especially those abundant in stages present in humans, can give important clues for the design of new treatments and drugs. The resolution of protein structure is an important tool for elucidating its function and may help clarify the mechanisms of infection. The analysis of the genome of *T. cruzi* has identified a new family of proteins: TcTASV. The main characteristic of these proteins is the abundance of Alanine, Serine and Valine residues. Another feature is the conservation of the amino- and carboxy- termini portion which constitutes a GPI anchor to membrane and the variation of the central core. (2) One member of the TcTASV family is called TASV-A and it is the object of study in this work. The main objective is to solve its structure by nuclear magnetic resonance. By analyzing the sequence of residues of a TASV-A protein, we determined that it is a transmembrane protein. Due to the difficulty of purification of such proteins, we decided to work simultaneously with two constructs: one with and another without the transmembrane portion (the GPI anchor). The main idea is to determine the structure of the more simplified construction, and conduct structural studies comparing with the more complex one, emphasizing the changes that occur from one form to another, and in different chemical environments. Until now we were able to amplify the gene encoding the construction without the transmembrane portion. The next steps include amplifying the other gene and express them both, so we can proceed with the structural analysis.

**Keywords:** *Trypanosoma cruzi* Ala, Ser and Val rich proteins. *Trypanosoma cruzi*. Nuclear Magnetic Resonance.

#### Referências:

- 1 RASSI JUNIOR, A.; RASSI, A.; MARIN NETO, J. A. Chagas disease. **Lancet**, v. 375, n. 9723, p. 1388-1402, 2010.
- 2 GARCÍA, E. A. et. al. TcTASV: a novel protein family in *Trypanosoma cruzi* identified from a subtractive trypomastigote cDNA library. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 4, n. 10, p. e841-1-e841-13, 2010.

## PG186

### Estudo dos processos de fotodegradação de politiofenos utilizando Ressonância Magnética Nuclear.

SILVA, U. B.<sup>1</sup>; AZEVEDO, E. R.<sup>1</sup>; FERREIRA, G. R.<sup>1</sup>

uilson.silva@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto a ser desenvolvido tem por objetivo principal a investigação do processo de fotodegradação de derivados do politiofeno. Uma das principais características do politiofeno e derivados é a possibilidade de alterações em sua cadeia lateral, o que resulta na modulação planejada das propriedades eletrônicas do polímero.(1) Ademais, as alterações na síntese e na cadeia lateral dessa classe de polímeros podem produzir, também, polímeros com diferenças de regio-regularidade e massas moleculares controladas.(2) Além das modificações químicas, é possível, ainda, utilizando diferentes solventes e tratamentos térmicos obter filmes de politiofenos com diferentes morfologias e graus de cristalinidade. Essa versatilidade de manipulação química e estrutural, faz dos politiofenos um dos polímeros mais empregados para aplicação em eletrônica orgânica, em particular em células fotovoltaicas. Contudo, a utilização do material em atmosfera oxidante atrelada à exposição à radiação provoca a ocorrência de processos oxidativos na cadeia polimérica principal que são responsáveis por alterações em sua estrutura eletrônica e propriedades eletro-ópticas que, por sua vez, podem produzir considerável redução na performance de células fotovoltaicas que apresentam este polímero como camada ativa.(3) Dessa forma, o presente estudo avaliará as alterações induzidas pela exposição à radiação eletromagnética na estrutura química, empacotamento e dinâmica molecular de diferentes derivados do politiofeno com variação de regio-regularidade, cristalinidade e morfologia. Pretende-se ainda avaliar, as consequências dessas alterações nas propriedades eletro-ópticas do polímero. Neste sentido, a motivação inicial deste trabalho é a compreensão das reações envolvidas no processo oxidativo de diferentes derivados do politiofeno, bem como no empacotamento e na dinâmica molecular desses polímeros. No decorrer do trabalho a relação entre estrutura da cadeia lateral, regioregularidade, cristalinidade, morfologia e a cinética do processo será avaliada.

**Palavras-chave:** Fotodegradação. Politiofeno. Processo oxidativo.

#### Referências:

- 1 BEAUJUGE, P. M.; REYNOLDS, J. R. Color control in pi-conjugated organic polymers for use in electrochromic devices. **Chemical Reviews**, v. 110, n. 1, p. 268-320, 2010.
- 2 ABDU, M. S. A.; HOLDCROFT, S. Mechanisms of photodegradation of poly(3-alkylthiophenes) in solution. **Macromolecules**, v. 26, n. 11, p. 2954-2962, 1993.
- 3 CHANG, Y. M.; SU, W. F.; WANG, L. Influence of photo-induced degradation on the optoelectronic properties of regioregular poly(3-hexylthiophene). **Solar Energy Materials and Solar Cells**, v. 92, n.



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

7, p. 761-765, 2008.

## PG187

### Modo dipolar do centro de massa de um condensado aprisionado

SMAIRA, A. F.<sup>1</sup>; CARACANHAS, M. A.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

andre\_smaira@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Condensados de Bose-Einstein são sistemas macroscópicos excelentes para a observação de comportamentos quânticos da matéria (1). Uma parte importante na pesquisa deles é a observação dos modos coletivos quando aprisionados em armadilha harmônica. Nesse trabalho abordaremos as excitações do modo dipolar e quadrupolar do superfluido. Mostraremos através de simulações computacionais (2) a oscilação dipolar do centro de massa de um condensado aprisionado, analisando também a influência da inclusão de uma perturbação no potencial de aprisionamento harmônico, a qual consistirá de uma barreira no mínimo do potencial, com altura e largura variáveis. Terminaremos nossas análises adicionando uma anomalia à função de onda inicial do condensado, representando um "vórtice unidimensional" no nosso sistema condensado, que corresponde a mais uma assinatura da natureza superfluida desse sistema, e analisando as mudanças que isso trará ao consequente movimento do centro de massa em função da intensidade da interação entre partículas e da energia inicial do nosso sistema condensado.

**Palavras-chave:** Condensado de Bose-Einstein. Átomos frios. Física atômica.

#### Referências:

- 1 PETHICK, C. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- 2 MURUGANANDAM, P.; ADHIKARI, S.K. Numerical study of the coupled time-dependent Gross-Pitaevskii equation: application to Bose-Einstein condensation. **Physical Review**, v. 63, n.5, pt.2, p.056704, Apr. 2001.

## PG188

### Decoerência e recoerência na dinâmica de estados quânticos: influência da injeção de ruído estocástico clássico

SOARES, P. M. S. B<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>

pmsoares02@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A aplicação da mecânica quântica para o processamento de informação fez com que os processos que levam à perda de características quânticas fossem estudados com maior interesse. Desde então, o maior obstáculo que os pesquisadores desta área enfrentam é: Como entender a interação do sistema de interesse com o ambiente? Em sistemas quânticos abertos tal interação é responsável pelo fenômeno de decoerência, que invalida o princípio da superposição, e transforma estados inicialmente puros numa mistura estatística de estados possíveis. (1) Reservatórios térmicos são comumente utilizados para modelar a influência inevitável do mundo externo. Além disso, o avanço tecnológico permite que monitoremos a influência de campos estocásticos gerados através da interação do sistema de interesse com o aparato experimental, o que nos motiva a desenvolver um modelo exato para a dinâmica de sistemas quânticos sujeitos campos estocásticos clássicos. (2) Inúmeros trabalhos são realizados visando construir mecanismos de proteção e evitar a perda de informação para o ambiente, recuperando assim a potencialidade oferecida pela natureza quântica de certos algoritmos. Neste ponto, surge a seguinte pergunta: seria possível utilizar ruído estocástico para anular os efeitos do ruído térmico? Em outras palavras, o que desejamos é construir um ambiente artificial onde a ação do banho térmico seja minimizada pela presença de um campo estocástico clássico. O objetivo do trabalho é investigar a influência da injeção de ruído estocástico colorido sob a dinâmica de um oscilador harmônico em contato com o banho térmico, quando este é inicialmente preparado numa superposição de estados coerentes conhecida como estado de gato de Schrödinger. Faremos isso através de uma equação mestra e das distribuições de quase probabilidade: a função P de Glauber-Sudarshan e a função de Wigner. Especula-se que a recoerência provocada pela presença do ruído estocástico colorido seja uma assinatura de não-markovianidade. Esperamos quantificar tal fenômeno (3), responder à questão inicial e à mais questões que porventura surgirem no decorrer do trabalho.

**Palavras-chave:** Informação quântica. Computação quântica. Decoerência.

#### Referências:

- 1 BREUER, H. P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. Oxford: Oxford University Press, 2002.
- 2 BUDINI, A. A. Quantum systems subject to the action of classical stochastic fields. **Physical Review A**, v. 64, n. 5, p. 052110-1-052110-12, 2001.
- 3 BREUER, H. P.; LAINE, E. M.; PILO, J. Measure for the degree of non-Markovian behavior of



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

quantum processes in open systems. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 21, p. 210401-1-210401-4, 2009.

**PG189****On the quantization of surface plasmon polaritons**SOBREIRA, F. W. A.<sup>1</sup>; MAREGA JUNIOR, E.<sup>1</sup>; PEREIRA, R. G.<sup>1</sup>

fwellysson@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

In the present work it will be introduced a fully quantized model for the interaction of Surface Plasmon Polaritons (SPPs) and semiconductor Quantum Dots (QDs). The study of SPPs has increased since the obtention of an Extraordinary Optical Transmission (EOT) in the work by Ebbesen. (1) This work will focus on the quantization of SPPs as described by Tame. (2) It is divided into three main parts; 1) The quantization of SPPs propagating on a cylindrical waveguide is performed, preceded by a revision of the quantization for a planar system (the interface between a metal and an insulator), this is how we can obtain the SPP modes in a 2<sup>nd</sup> quantization language. 2) We obtain the Hamiltonian for such a system composed by the SPPs, represented by their bosonic operators  $b$  and  $b^\dagger$ , and by a QD, written in terms of fermionic operators  $\sigma^+$  and  $\sigma^-$ . 3) Some experimental results for polarization and photoluminescence measurements of such a system composed by SPPs and QDs are discussed in terms of our theoretical model.

**Keywords:** Surface plasmon polariton. Quantization. Quantum dots.**Referências:**

- 1 EBBESEN, T. W.; LEZEC, H. J.; GHAEMI, H. F.; THIO, T.; WOLFF, P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. **Nature**, v. 391, p. 667-669, 1998.doi:10.1038/35570.
- 2 TAME, M. S.; MCENERY, K. R.; OZDEMIR, S. K.; LEE, J.; MAIER, S. A.; KIM, M. S. Quantum plasmonics. **Nature Physics**, v. 9, n. 6, p. 329-340, 2013.



## PG190

### Modeling with equivalent circuits to explain the influence from polyelectrolytes in electrolyte-insulator-semiconductor capacitors used in biosensors

SOUSA, M. A. M.<sup>1</sup>; SIQUEIRA JUNIOR, J. R.<sup>2</sup>; VERCIK, A.<sup>3</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>

marcos.moura.fis@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Exatas, Naturais e Educação - UFTM

<sup>3</sup>Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos - USP

Biosensors based on Metal-Insulator-Semiconductor (MIS) devices can be manufactured with a large number of architectures, including Electrolyte-Insulator-Semiconductor (EIS) devices, which are capacitors where metal electrodes are replaced by an electrolyte solution and nanostructures are incorporated above the insulator layer. The nanostructures play an important role in the ion transport arising from enzymatic reactions. (1) Such devices detect pH changes by measuring the capacitance as a function of the bias voltage in the depletion regime in the semiconductor. It is therefore important to estimate the influence from the nanostructures on the flat band potential. (2) Dendrimers (PAMAM) and single-walled carbon nanotubes (SWNT) were adsorbed on SiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub>/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> layers using the layer-by-layer (LbL) technique. In this study the enzymatic activity was replaced by buffer solution with neutral pH. Capacitance versus potential curves were employed to evaluate the dopant concentrations and flat band potentials as functions of the a.c. signal frequency. Impedance spectroscopy measurements were performed to monitor the chip electrical behavior after each bilayer was adsorbed, whose data were analyzed with equivalent circuits containing a double-layer capacitance, constant phase element impedance and depletion capacitance. The results suggest best fitting for a frequency of 2 kHz, where the doping concentration was  $6.6 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$  for the chip with SiO<sub>2</sub> layer and  $1.1 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$  for the chip with SiO<sub>2</sub>/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> layer. The flat band voltage was -0.2 V and -0.06 V, respectively. In the analysis of the chip coated with different numbers of PAMAM/SWNT bilayers, we found that the positive charges in the PAMAM layer, in comparison with the negative charges in the SWNT, have a higher contribution for the appearance of depletion on the silicon chip, thus shifting the flat band potential. As for the implications for biosensors, optimized performance should be reached with three PAMAM/SWNT bilayers, which is consistent with the empirical finding in the literature that sensors with a few bilayers often provide the highest performance. (3)

**Keywords:** EIS capacitors. Equivalent circuit. Carbon nanotube.

#### Referências:

1 SIQUEIRA JUNIOR, J. R. et al. Penicillin biosensor based on a capacitive field effect structure functionalized with a dendrimer carbon nanotube multilayer. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 25,

n. 2, p. 497-501, Oct. 2009.

2 ABOUZAR, M. H. et al. Capacitive electrolyte insulator semiconductor structures functionalised with a polyelectrolyte enzyme multilayer: new strategy for enhanced field-effect biosensing. **Physica Status Solidi A**, v. 207, n. 4, p. 884-890, Apr. 2010.

3 GASPARYAN, F. V. et al. Low frequency noise in field effect devices functionalized with dendrimer carbon nanotube multilayers. **IEE Sensors Journal**, v. 11, n. 1, p. 142-149, Jan. 2011.

## PG191

### Estudo das propriedades optoeletrônicas das células eletroquímicas emissora de luz

SOUSA, W. da S.<sup>1</sup>; FARIA, R. M.<sup>1</sup>

wssousa@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As células eletroquímicas poliméricas emissoras de luz (PLEC) (1) são uma alternativa tecnológica aos dispositivos emissores de luz (OLED). As LECs diferem do OLEDs pela presença de polímero eletrólito na camada ativa, no qual resulta em algumas vantagens. Dentre elas destacam-se a baixa sensibilidade à espessura do dispositivo e da função trabalho dos eletrodos. A liberdade na escolha dos eletrodos das PLECs facilita o processo de produção dos mesmos, podendo produzir dispositivos totalmente orgânicos e flexíveis. (2) Mas os mecanismos de funcionamento das LECs não são bem entendidos ainda. Para compreender melhor esses fenômenos físicos nós fabricamos várias LECs na estrutura ITO/Blenda/Al, sendo que a blenda é formada pelo polímero luminescente com nome de catálogo de ADS108GE, Polióxido de etileno (PEO) e triflato de lítio (TriLi) na seguinte proporção 1:1:0.1, respectivamente. Foram realizadas várias medidas de impedância/admitância e medidas transientes com vários pulsos de voltagem. As medidas de impedância mostram uma grande dependência da temperatura principalmente acima de -40 °C, no qual é próximo da temperatura de transição vítrea do PEO. As curvas de corrente em função da tensão tendem para uma simetria. A tensão de operação dos dispositivos varia de 3,5 a 4,5 V e luminescência foi de centenas de cd/m<sup>2</sup>. A Eletroluminescência apresenta um pico em 519 nm com um ombro em 538 nm e a largura do pico a meia altura é de 50nm.

**Palavras-chave:** Células eletroquímicas emissora de luz. Polímeros luminescentes. Polieletrólito.

#### Referências:

- 1 PEI, Q.B.; YU, G.; ZHANG, C.; YANG, Y.; HEEGER, A.J. Polymer light-emitting electrochemical cells. **Science**, v.269, n. 5267, p.1086 1088, 1995.
- 2 MATYBA, P.; YAMAGUCHI, H.; CHHOWALLA, M.; ROBINSON, N.D.; EDMAN, L. Flexible and metal-free light-emitting electrochemical cells based on graphene and PEDOT-PSS as the electrode materials. **ACS Nano**, v. 5, n. 1, p. 574 580. 2011. .

## PG192

### Estudos da diversidade química e biológica de moduladores e alvos moleculares para a terapia da doença de Chagas

SOUZA, A. S.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

anacletoasilvadesouza@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS), cerca de 15 milhões de pessoas estão infectadas com a doença de Chagas no mundo e 100 milhões se encontram em áreas de risco. A grande maioria dos infectados vive em países latino-americanos, mas a doença começa a preocupar outras regiões geográficas, tais como América do Norte, Europa e Oceania. Considerando-se o problema grave de saúde pública e as limitações terapêuticas, o presente trabalho de mestrado tem como objetivo principal desenvolver uma nova estratégia terapêutica para a terapia da doença alvo, através do combate ao seu agente causador, o *Trypanosoma cruzi*. Inicialmente fez-se uma pesquisa ampla de banco de dados que descreveram moléculas e ensaios biológicos contra esse agente etiológico e/ou alvos moleculares. Para isso, realizou-se uma busca por palavras-chave, e foram selecionados documentos que possuíam moléculas e/ou alguma informação sobre parâmetros farmacoterapêuticos (e.g., % de inibição, log P, IC50, ED50, Ki). (1) Primeiramente serão identificadas subestruturas químicas que compõem as moléculas que interagem com alvos moleculares comuns e/ou com o próprio parasita. (2) Será feita uma comparação desses grupos químicos com a atividade biológica, e a partir disso será desenvolvido estudos das relações entre a estrutura e atividade visando o planejamento de novos candidatos a fármacos que possuam arquitetura molecular privilegiada em relação a vários parâmetros moleculares, farmacocinéticos e farmacodinâmicos. Métodos e estratégias em química medicinal e computacional serão amplamente empregados neste trabalho para a criação de bases de dados, análise de informação e geração de modelos 2D e 3D.

**Palavras-chave:** Doença de Chagas. *Trypanosoma cruzi*. Novos moduladores.

#### Referências:

- 1 COURA, J. R.; CASTRO, S. L. A critical review on Chagas disease chemotherapy. **Memorias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 97, n.1, p.3-24, 2002.
- 2 McGRATH, M. E. et al. The crystal structure of cruzain: a therapeutic target for Chagas' disease. **Journal of Molecular Biology**, v. 247, n. 2, p. 251-259, 1995.

## PG193

### Identificação de novos inibidores da enzima cruzaina de *Trypanosoma cruzi* candidatos a fármacos na terapia da doença de Chagas

SOUZA, M. L.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

marianalaureano@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

A doença de Chagas, infecção causada pelo *Trypanosoma cruzi*, é um problema de saúde pública, sendo a situação mais grave observada na América Latina. O arsenal terapêutico contra a doença é bastante limitado e insuficiente em todos os aspectos clínicos. Visando o desenvolvimento de novos agentes antichagásicos, várias proteínas do parasita têm sido exploradas como alvos terapêuticos. A enzima cruzaina, uma cisteína protease envolvida nos estágios de desenvolvimento e diferenciação do T. cruzi (1), foi selecionada para os nossos estudos, visando a identificação de inibidores através do método de planejamento de fármacos baseado na estrutura do receptor (SBDD, do inglês, structure-based drug design). (2) A seleção de 19 estruturas cristalográficas da enzima cruzaina, em complexo com ligantes, permitiu a aplicação de métodos de SBDD. Duas bases de dados, líder-similar (*lead-like*) e fragmento-similar (*fragment-like*), foram coletadas da base de dados ZINC. Inicialmente, o programa DOCK 3.5.54 foi empregado na triagem virtual das bases de dados utilizando-se a estrutura cristalográfica PDB ID: 3KKU. As bases foram classificadas e utilizadas na triagem virtual com os programas GOLD 4.0.1 e Surflex (Sybyl 8.0). As 500 melhores moléculas selecionadas por cada um dos programas foram analisadas visualmente considerando-se diversas características estruturais dos subsítios da enzima cruzaina e dos ligantes (e.g., complementaridade molecular, flexibilidade, lipofilia do subsítio S2, presença de doadores e aceptores de hidrogênio). Um conjunto final de 18 compostos foi priorizado e avaliado experimentalmente através de ensaios bioquímicos *in vitro* frente à enzima cruzaina, dentre eles seis compostos apresentaram atividade inibitória. A integração de métodos experimentais e computacionais levou à identificação de inibidores inéditos da cruzaina. O mais potente desses inibidores (proveniente da base fragmento similar) apresentou alta afinidade e considerável atividade de inibição da proliferação do parasita ( $IC_{50} = 3,4 \pm 0,8 \mu M$ ), mostrando-se um excelente composto-líder com potencial para o desenvolvimento de novos candidatos a fármaco para o tratamento da doença de Chagas.

**Palavras-chave:** *Trypanosoma cruzi*. Doença de Chagas. Cruzaina.

#### Referências:

- 1 CAZZULO, J. J.; STOKA, V.; TURK, V. The major cysteine proteinase of *Trypanosoma cruzi*: a valid target for chemotherapy of Chagas disease. **Current Pharmaceutical Design**, v. 7, n. 12, p. 1143-1156, 2001.
- 2 ANDRICOPULO, A. D.; SALUM, L. B.; ABRAHAM, D. J. Structure-based drug design strategies in



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

medicinal chemistry. **Current Topics in Medicinal Chemistry**, v. 9, n. 9, p. 771-790, 2009.

## PG194

### Supercontinuum pulse train fluorescence technique: triplet state dynamics determination

SOUZA, T. G. B.<sup>1</sup>; DE BONI, L.<sup>1</sup>

tiago.gualberto.souza@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The main aim of this study is the development a new spectroscopic technique based on fluorescence signal, called White-light Pulse Train Fluorescence (WLPTF). (1) It will be used to measure and analyze the excited state dynamics and triplet state formation of distinct organic material, such as porphyrins and phthalocyanines. Analyzing the fluorescence signal produced by a pulse train, one could determine the excited state relaxation times such as intersystem crossing just by observing the way that the fluorescence signal changes. Thus, if the fluorescence signal does not follow the pulse train reference, intersystem-crossing channels are available on the sample, and the rate that these channels are formed can be determined by simulating the observable fluorescence just using a rate equation model based on a three energy levels diagram and knowing the pulse train shape (reference). In most of the cases, the levels considered in this analyze are the ground and first excited electronic singlet states, which are directly related with the fluorescence signal, and one triplet state responsible for the annihilation of the fluorescence signal. This technique is similar to the one known as Pulse Train Fluorescence technique (PTF). However, the innovation of the present technique is to replace, a monochromatic 100 picosecond 532 nm train of pulses for a shortness white-light supercontinuum train of pulses. This configuration will allow one to have the possibility of excite a desired material at different wavelength regions ranged between 400 - 750 nm (wavelength tunable), which decreases the limitation that the old technique has. By using a color filter, measurements at different wavelengths can be performed in order to analyze a possible triplet formation energy dependent. Additionally, the wavelength tenability of the present technique allows one to study samples that are transparent at 532 nm, increasing the possibility of the samples to be studied. In order to establish if this technique is reliable to be used in spectroscopic studies, a set of four porphyrins are going to be used and characterized through a well-known Z-scan technique as well as the old Pulse Train fluorescence one. Consequently, knowing the spectroscopic parameter of the four samples, the WLPTF can be calibrated. It is important to mention here that the great advantage of this technique for measure the triplet state formation is the reduced amount of adjustable parameters used by the mathematical model to fit the experimental data. While others techniques, such as Flash Photolysis and Z-scan, need adjust two or more parameters to fit the experimental data, thus increasing the error associated with their values, the present technique use only one: the intersystem-crossing time.

**Keywords:** Spectroscopy. Fluorescence. Porphyrin.

#### Referências:

1 DE BONI, L.; FRANZEN, P. L. ; GONÇALVES, P. J.; BORISSEVITCH, I. E.; MISOGUTI, L.;



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

MENDONÇA, C. R.; ZILIO, S. C. Pulse train fluorescence technique for measuring triplet state dynamics. **Optics Express**, v. 19, n. 11, p.10813-10823, May 2011.



## PG195

### Identification of Mn/FeSODs structural determinants necessary to metal specificity

STELMASTCHUK, L. B. F.<sup>1</sup>; CHAMBERGO, F. S.<sup>1</sup>; FERREIRA JÚNIOR, J. R.<sup>1</sup>; GARRATT, R. C.<sup>2</sup>

laure.stelmastchuk@gmail.com

<sup>1</sup>Escola de Artes, Ciências e Humanidades - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Superoxide dismutases (SODs) are metalloenzymes that convert the superoxide anion in molecular oxygen (O<sub>2</sub>) and hydrogen peroxide (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>). The metal in the catalytic center of such enzymes is directly related to their catalysis mechanisms and tridimensional structures. Evolutionarily, MnSOD and FeSOD may have evolved from a common ancestor, because both proteins have homologous primary sequences and superposable crystallographic structures. However, at the catalytic level, both proteins diverged sufficiently to prevent interchange of their metallic centers, which would generate non-functional enzymes, indicating that these proteins have high metal specificity. The objective of this research project is to identify structural determinants of *Trichoderma reesei* MnSOD (TrMnSODB) (1), necessary to metal specificity. Mutant genes will be constructed and their proteins expressed, purified and crystallized. The tridimensional structure of such mutants will be solved by X-ray crystallography and their enzymatic activities determined, as well as their electron paramagnetic resonance spectra. We hypothesize that SCA (Statistical Coupling Analysis) is useful to identify amino acid candidates for sitedirected mutagenesis to design new SODs with intermediated Mn/Fe specificity (2), and even metal specificity interconversion, by studying the evolutionary history of these proteins.

**Palavras-chave:** Superoxide dismutases. *Trichoderma reesei*. Metal specificity.

#### Referências:

1 CHAMBERGO, F. S.; VALENCIA, E. Y.; FERREIRA JÚNIOR, J. R.; CAMILO, C. M.; CAMPANA, P. T. Conformational stability of recombinant manganese superoxide dismutase from the filamentous fungus *Trichoderma reesei*. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 50, n. 1, p. 19-24, Jan. 2012.

2 BACHEGA J. F.; NAVARRO M. V. A.; BLEICHER, L.; BUGS, R. K. B.; DIVE, D; HOFFMANN, P; VISCOGLIOSI, E.; GARRATT, R. C. Systematic structural studies of iron superoxide dismutases from human parasites and a statistical coupling analysis of metal binding specificity. **Proteins**, v. 77, n. 1, p. 26-37, Oct. 2009 .

## PG196

### Desenvolvimento de nova técnica de diagnóstico para tumores não profundos a partir de medidas termográficas

STRINGASCI, M. D.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

mirianstringasci@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer é responsável por cerca de 13% de todas as causas de óbito no mundo, portanto mais de 7 milhões de pessoas morrem anualmente da doença. Sabe-se, porém, que na maioria dos casos, as chances de sobrevivência são muito maiores quando diagnosticado em estágios iniciais. Na literatura, já se sabe que as lesões tumorais presentes no tecido apresentam maior temperatura se comparado com a parte sadia do tecido, devido a grande vascularização presente nestas lesões. (1,2) Pensando nesta diferença de temperatura algumas pesquisas vem sendo desenvolvidas na tentativa de estabelecer novos métodos de diagnósticos da doença, porém, em sua maior parte, são utilizados métodos de altos custos, como nanopartículas e câmera termográfica. (1) Neste estudo pretendemos estabelecer uma forma de diagnosticar tais lesões a partir de um método que seja financeiramente viável. Inicialmente, buscaremos entender o processo evolutivo de um tumor ao ser injetado no tecido e sua regressão depois de ser aplicada a Terapia Fotodinâmica (TFD) como forma de tratamento. Para isso, serão utilizados camundongos Hairless machos, nestes serão injetado células de melanoma murino (B16F10) e de tumor de Ehrliche, e será também utilizada uma câmera termográfica para registrar o tumor. A TFD será realizada utilizando Photogem® na concentração 1,5mg por 1Kg de massa do animal administrado via sistêmica e irradiando com 630nm e 100mW de potência. Paralelo a este estudo, será construída uma malha de pequenas fitas termossensíveis para poder mapear temperaturas presentes em diferentes áreas de um tecido. Estas fitas podem ser adquiridas com baixo custo, nos possibilitando ter um método vantajoso para diagnosticar tumores não profundos.

**Palavras-chave:** Diagnóstico de tumores. Termografia. Variação de temperatura.

#### Referências:

- 1 WOODBURN, K. W.; FAN, Q.; KESSEL, D.; LUO, Y.; YOUNG, S. W. Photodynamic therapy of B16F10 murine melanoma with lutetium texaphyrin. **Journal of Investigative Dermatology**, v. 110, n. 5, p. 746-751, 1998.
- 2 HADDAD, R.; BLUMENFELD, A.; SIEGAL, A.; KAPLAN, O.; COHEN, M.; SKORNICK, Y.; KASHTAN, H. In vitro and in vivo effects of photodynamic therapy on murine malignant melanoma. **Annals of Surgical Oncology**, v. 5, n. 3, p. 241-247, 1998.

## PG197

### Estudo de excitações randômicas em superfluidos atômicos

TAVARES, P. E. S.<sup>1</sup>; SHIOZAKI, R. F.<sup>1</sup>; BAHRAMI, A.<sup>1</sup>; TONIN, Y. R.<sup>1</sup>; TELLES, G. D.<sup>1</sup>; HENN, E. A. de L.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; FARIAS, K. M.<sup>1</sup>

pedro.ernesto.tavares@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Em uma primeira série de estudos, excitando um condensado de Bose-Einstein através de um campo magnético oscilatório, observamos a formação de vórtices (1), turbulência quântica (2) e a fragmentação do condensado. (3) Continuaremos esses estudos, investigando a evolução desses regimes em função da forma de excitação. Neste caso, ao invés de excitar o condensado com um campo magnético temporalmente oscilatório, iremos aplicar um campo magnético temporalmente randômico. O comportamento esperado é que o superfluido evolua para o estado de fragmentação sem necessariamente passar por outros estágios, pois através de uma oscilação randômica podemos acessar um conjunto de frequências e amplitudes deferentes numa única excitação. Dentre os efeitos que esperamos estudar, podemos destacar: a produção de vórtices, o estudo do regime de turbulência quântica, o estudo da fragmentação do superfluido, os efeitos de localização (tipo a localização de Anderson, porém no regime temporal), e a analogia entre uma perturbação espacialmente randômica e uma perturbação temporalmente randômica. Para a realização do experimento, começaremos com uma nuvem atômica de  $2 \times 10^5$  átomos condensados, em uma armadilha magnética harmônica do tipo QUIC (configuração quadrupolo-loffe). Após atingirmos a condensação, com o campo de aprisionamento ainda ligado, introduziremos uma perturbação magnética a esse potencial, esse campo adicional será gerado por um par de bobinas em configuração anti-Helmholtz. Dessa forma, a variação temporal do campo magnético de excitação será controlada pela corrente que circula nas bobinas de excitação. Após a excitação do condensado, esperaremos a evolução da amostra superfluida em seus modos coletivos de excitação. Esse tempo de espera será um parâmetro adicional para caracterizarmos os efeitos da excitação. Por fim, após esse tempo de espera, desligaremos o campo de aprisionamento e deixaremos a nuvem expandir balisticamente por um certo tempo de voo e, então, faremos uma imagem de absorção da nuvem por meio de um feixe de luz ressonante, da qual extrairemos as informações necessárias (como, por exemplo, a temperatura da nuvem, suas dimensões e o perfil de densidade) para caracterizar a nuvem atômica. Para a realização desse experimento algumas etapas já foram concluídas. Temos um sistema de duplo-MOT onde o primeiro MOT (MOT1) é a fonte de átomos para o segundo MOT (MOT2). O MOT1 é produzido em uma câmara de alto-vácuo ( $\sim 4 \times 10^{-9}$  Torr) e o MOT2 fica na região de ultra-alto-vácuo ( $\sim 1 \times 10^{-12}$  Torr), necessário para a produção do condensado de Bose-Einstein. No MOT2, são carregados cerca de  $5 \times 10^8$  átomos em 30 segundos. Após o carregamento do MOT2, transferimos esses átomos para uma armadilha harmônica do tipo QUIC, onde iniciamos o processo de resfriamento evaporativo por radio frequência. Realizada de forma auto-sustentada (onde há um aumento da densidade no espaço de fase e a taxa de colisão elástica entre os átomos é mantida ou aumentada), a sequência do resfriamento evaporativo nos conduz à degenerescência quântica. Após a otimização desse processo, conseguimos condensados com cerca de  $1.8 \times 10^5$  átomos. O próximo passo é a introdução da excitação nesse condensado.

**Palavras-chave:** Condensado de Bose-Einstein. Superfluidos atômicos. Turbulência quântica.

**Referências:**

- 1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; RAMOS, E. R. F.; CARACANHAS, M. A.; CASTILHO, P.; OLÍMPIO, E. P.; ROATI, G.; MAGALHÃES, D. V.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n.4, p. 043618, 2009.
- 2 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, n. 103, n.4, p. 045301, 2009.
- 3 SEMAN, J. A.; HENN, E. A. L.; SHIOZAKI, R. F.; ROATI, G.; POVEDA-CUEVAS, F. J.; MAGALHÃES, K. M. F.; YUKALOV, V. I.; TSUBOTA, M.; KOBAYASHI, M.; KASAMATSU, K.; BAGNATO, V. S. Route to turbulence in a trapped Bose-Einstein condensate. **Laser Physics Letters**, v. 8, p. 691, 2011. doi:10.1002/lapl.201110052.

## PG198

### Structural studies on *Trypanosoma cruzi* P21 protein as a strategy for chagas disease treatment

TEIXEIRA, F. B.<sup>1</sup>; CRUSCA, E.<sup>1</sup>; HORJALES, E.<sup>1</sup>; MUNTE, C. E.<sup>1</sup>

francesco.teixeira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Cell invasion by the different infective forms of *Trypanosoma cruzi*, the causative parasite of Chagas disease, involves several mechanisms which culminate in entry of *T. cruzi* into host cells. Numerous studies have been performed in order to identify surface and secreted proteins related to cell invasion, mostly from metacyclic and tissue culture trypomastigote forms. However, little attention has been given to the extracellular amastigote, also capable to invade mammalian cells in an alternative invasion mechanism. The molecules involved in this alternative process are still poorly known or studied and may be significant to *T. cruzi* survival under high cytotoxic conditions afforded by the host cells. In this context, a new protein named P21 has been recently identified. Its participation in the invasion mechanism cannot yet be explained at molecular level, but experiments suggest that P21 interacts with the CXCR4 chemokine receptor, activating phagocytosis in macrophages and promoting actin polymerization in mammalian cells. As the first step towards P21 NMR structural studies, we developed a purification/refolding protocol and performed the <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C and <sup>15</sup>N sequential assignment using triple resonance NMR spectra (Bruker 600 MHz). The secondary structure prediction, based on chemical shifts (TALOS+), showed five alpha-helix regions and an unstructured N-terminal region (residues 1-42). We also identified several regions of the protein with multiple conformations, indicating a large structural flexibility. Future structural and interaction experiments with the N-terminal peptide of CXCR4, essential for the protein activation, may lead to a new therapy based on peptides, which may change the current scenario on the Chagas disease treatment.

**Keywords:** *Trypanosoma cruzi*. Protein structure determination. NMR spectroscopy.

#### Referências:

- 1 DA SILVA, C. V. et al. Characterization of a 21 kDa protein from *Trypanosoma cruzi* associated with mammalian cell invasion. **Microbes and Infection**, v. 11, n. 5, p. 563-570, Apr. 2009.
- 2 RODRIGUES, A. A. et al. A recombinant protein based on *Trypanosoma cruzi* P21 enhances phagocytosis. **Plos One**, v. 7, n. 12, p. 9, Dec. 2012.

## PG199

### Engenharia de máquina de Stirling em armadilhas iônicas e protocolo de medida da função de distribuição do trabalho

TEIZEN, V. F.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

victor.teizen@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

As ligações entre a termodinâmica e a mecânica quântica mostram-se interessantes tópicos de pesquisa desde os anos 50 e tem atraído cada vez mais atenção nos últimos anos, tanto por suas possíveis aplicações tecnológicas, quanto pelo aspecto teórico - como, por exemplo, as relações de sistemas quânticos com a segunda lei da termodinâmica. (1-2) Para sistemas quânticos mesoscópicos (ou até macroscópicos), restritos apenas a um número relativamente pequeno de estados energéticos, torna-se necessária uma generalização da termodinâmica usual, por vezes chamada de termodinâmica quântica. Neste trabalho mostramos como construir uma máquina de Stirling no contexto de íons aprisionados. Para isso, faz-se necessária a engenharia de frequências dependentes do tempo do modo vibracional do íon, além da engenharia de reservatórios térmicos com temperaturas controladas. Após a construção de máquinas de Stirling e do cálculo do trabalho e da eficiência associados apresentamos um protocolo para a medida da função de distribuição do trabalho que recorre às medidas dos níveis de energia eletrônicos do íon para, a partir destas, extrair-se informação sobre o seu estado vibracional. (1-3)

**Palavras-chave:** Engenharia de reservatórios. Trabalho. Termodinâmica quântica.

#### Referências:

1 KIEU, T. D. The second law, Maxwell's demon, and work derivable from quantum heat engines. **Physical Review Letters**, v. 93, n. 14, p. 140403-1-140403-4, Oct. 2004.

2 QUAN, H. T.; LIU, Y.; SUN, C. P.; NORI, F. Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. **Physical Review E**, v. 76, n. 3, p. 031105-1-031105-18, 2007.

3 QUAN, H. T. Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. II. **Physical Review E**, v. 79, n. 4, p. 041129-1-041129-10, 2009.

## PG200

# Coupling vortex dynamics with collective excitations in Bose-Einstein condensates

TELES, R. P.<sup>1</sup>; SANTOS, F. E. A.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

rafael.fisica.unesp@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Here we analyze the collective excitations as well as the expansion of a trapped Bose Einstein condensate with a vortex line at its center. To this end, we propose a variational method where the variational parameters have to be carefully chosen in order to produce reliable results. (1-3) Our variational calculations agree with numerical simulations of the Gross Pitaevskii equation. The system considered here turns out to exhibit four collective modes of which only three can be observed at a time depending of the trap anisotropy ( $\omega_z/\omega_\rho$ ). We also demonstrate that these collective modes can be excited using well established experimental methods such as modulation of the s-wave scattering length,  $a_s(t) \approx a_0 + \delta a \cos(\Omega t)$ . Finally this approach allows us to generalize the time of flight of the vortex core from ref. (1).

**Keywords:** Vortex dynamics. Bose-Einstein condensate. Collective excitations.

### Referências:

- 1 TELES et al. Free expansion of Bose-Einstein condensates with multicharged vortex. **Physical Review A**, v. 87, n. 3, p. 033622-1-033622-6, 2013.
- 2 PÉREZ-GARCÍA, V. M. et al. Dynamics of Bose-Einstein condensates: variational solution of the Gross-Pitaevskii equation. **Physical Review A**, v. 56, n. 2, p. 1424-1432, Aug. 1997.
- 3 O'DELL, D. H. J.; EBERLEIN, C. Vortex in a trapped Bose-Einstein condensate with dipole-dipole interactions. **Physical Review A**, v. 75, n. 1, p. 013604-1-013604-11, 2007.

## PG201

### Planejamento estrutural por engenharia de cristais de uma nova modificação cristalina do fármaco antirretroviral de lamivudina (3TC): succinato monoidratado de lamivudina.

TENORIO, J. C.<sup>1</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, R.<sup>2</sup>

juanct@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

As técnicas de engenharia de cristais moleculares podem ser utilizadas para o melhoramento das propriedades farmacêuticas dos Insumos Ativos. (1) Desta forma reportamos a estrutura cristalina de um dos fármacos mais utilizados no tratamento da AIDS: lamivudina,  $\beta - L - 2',3' - \text{didesoxi} - 3' - \text{tiocitidina}$  (3TC), o succinato monoidratado de lamivudina ( $3TCH^+ - (suc^-) \cdot H_2O$ ). Nosso grupo de pesquisa reportou o sal farmacêutico de maleato de lamivudina, sendo este o primeiro reporte de sais de 3TC com ácidos orgânicos carboxílicos, planejado por engenharia de cristais. (2) O sal  $3TCH^+ - (suc^-) \cdot H_2O$  cristaliza no grupo espacial  $P2_12_12_1$ , tendo na unidade assimétrica um par iônico descrito pelo sinton molecular COO-NCN cujo motivo é  $R_2^2(8)$ . Análise supramolecular revelou a formação de um complexo molecular tetramérico em forma de colunas moleculares helicoidais, conformadas por unidades alternadas de  $3TCH^+$  e  $(suc^-)$ , estas colunas são estabilizadas por canais de moléculas de água, que por sua vez permitem a união com outras colunas tetraméricas no plano [100]. Interações intra e intermoleculares foram avaliadas a partir das superfícies de Hirshfeld e a partir de cálculos teóricos em nível de DFT. Por último, o ponto de fusão dos cristais em torno de 128-129°C foi determinado mediante microscopia térmica polarizada (Hot-stage). O baixo ponto de fusão assim como o seu comportamento supramolecular são indícios de que esta nova modificação sólida possa apresentar um aumento na solubilidade de equilíbrio em relação à forma II do fármaco 3TC utilizada comercialmente. (3)

**Palavras-chave:** Engenharia de cristais. Química supramolecular . Anti-retroviral .

#### Referências:

- 1 DE CLERCQ, E. Anti-HIV drugs: 25 compounds approved within 25 years after the discovery of HIV. **International Journal of Antimicrobial Agents** , v. 33, n. 4, p. 307-320, 2009.
- 2 MARTINS, F. T.; PAPARIDIS, N.; DORIGUETTO, A. N. C.; ELLENA, J. Crystal engineering of an anti-HIV drug based on the recognition of assembling molecular frameworks. **Crystal Growth & Design**, v. 9, n. 12, p. 5283-5292, 2009.
- 3 HARRIS, R. K.; YEUNG, R. R.; LAMONT, R. B.; LANCASTER, R. W.; LYNN, S. M.; STANFORTH, S. E. 'Polymorphism' in a novel anti-viral agent: lamivudine. **Journal of the Chemical Society Perkin**





SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

**Transactions 2**, n. 12, p. 2653-2660, 1997. doi: 10.1039/A704709F.

## PG202

### Estrutura da enzima methilthioadenosina fosforilase (MTAP) de *Schistosoma mansoni* mutante S12T em complexo com methiltioadenosina

TORINI, J. R.<sup>1</sup>; BRANDÃO NETO, J.<sup>2</sup>; PEREIRA, H. M.<sup>1</sup>

jutorini@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Harwell Science and Innovation Campus - Oxfordshire - United Kingdom

Causada pelo parasita *Schistosoma mansoni*, a esquistossomose é uma doença crônica que afeta 230 milhões de pessoas no mundo sendo 6 milhões somente no Brasil. (1) O parasita *S. mansoni* não possui a via de síntese de bases púricas e depende integralmente da via de salvação (2), por isso essa via é um alvo de interesse para o desenvolvimento de fármacos. A enzima MTAP catalisa a reação: 5'-metiltioadenosina (MTA) + fosfato = adenina + 5-metiltioribose (MTR) (3) mas passa a fazer parte desta via, uma vez que possui a capacidade de usar adenosina como substrato alternativo. A SmMTAP apresenta maior afinidade catalítica pelo substrato adenosina em comparação com MTA, seu substrato natural, e quando comparada à MTAP humana, a afinidade por adenosina é extremamente elevada no parasita. Substituições encontradas no sítio ativo da SmMTAP, podem explicar essa diferença na preferência catalítica. Uma dessas substituição é a troca de uma serina por uma treonina na posição 12, essa troca parece influenciar a estabilidade da molécula de fosfato no sítio ativo, o que pode favorecer a interação com a adenosina. A fim de investigar esta substituição, a enzima SmMTAP foi mutada e cristalizada. A mutação foi feita pela empresa Mutagenex, a proteína mutada foi expressa em meio 2xTY suplementado com 50 ug/mL de kanamicina, purificada por cromatografia de afinidade e dialisada em 20mM de Tris pH 7,4, 200mM de NaCl e 10 mM beta-mercaptoetanol. A cristalização foi feita em 100 mM Bis-tris com pH 6,1-6,5 e 14-18% de PEG3350. Os cristais obtidos foram submetidos à difração de raios-X na linha I04-1 do Diamond Light Source em Oxford Inglaterra. Obteve-se 15 conjuntos de dados, sendo 4 com a proteína mutada na forma apoenzima, 2 em complexo com ribose-1-fosfato, 2 com adenosina, 3 com tubercidina e 4 com MTA. Até o momento uma estrutura a 1,95Å de resolução em complexo com MTA foi resolvida por substituição molecular, usando a estrutura da SmMTAP nativa como modelo. A MTAP cristalizou no sistema monoclinico com o grupo espacial P21 com dimensões de cela a=76,81Å, b=73,91Å, c=81,29Å. O refinamento encontra-se com Rwork(%) = 16,5 e Rfree(%) = 19,4.

**Palavras-chave:** *S. mansoni*. MTAP. Fosforilase.

#### Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Schistosomiasis**: fact sheet nº 115. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs115/en/>>. Acesso em: 20 ago.2013.

2 SENFT, A. W. et al. Purine metabolism in *Schistosoma mansoni*. **International Journal for Parasitology**, v. 2, n.2, p. 249-260, June 1972.

3 PEGG, A. E.; WILLIAMS-ASHMAN, H. G. Phosphate-stimulated breakdown of 5'-methylthioadenosine by rat ventral prostate. **Biochemical Journal**, v. 115, n.2, p. 241-247, 1969.

## PG203

### Interacting studies of PelD and PelF, proteins involved on biofilm formation in *Pseudomonas aeruginosa*

TORRES, N. U.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

naiara.utimura@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

*Pseudomonas aeruginosa* is an opportunistic pathogen that can lead to many human infections, including cystic fibrosis. Moreover, *Pseudomonas* is a bacterium model by its ability to form biofilm, a cell community immersed in an exopolysaccharide matrix. Bacteria in this lifestyle usually grow up attached in a solid surface and get increased resistance against antibiotics and hostile environments. Biofilm formation is regulated by the small nucleotide bis (3'-5') cyclic dimeric guanosine monophosphate (c-di-GMP). (1) On high levels of intracellular c-di-GMP, *Pseudomonas* starts to produce an extracellular Pel polysaccharide, a matrix of unknown composition. Pel synthesis and translocation is done by seven proteins contained in the pel operon, PelA-F. Computational studies suggest that PelF is the glycosyl-transferase responsible for Pel polymer synthesis. In turn PelD is the only inner membrane protein with a cytoplasmatic domain regulated by c-di-GMP. Once biofilm formation and Pel production are dependent of c-di-GMP levels, it is speculated an interaction between PelD and PelF for the polysaccharide first membrane translocation. (2,3) In this context, we purpose to study the oligomeric state of those proteins and detect the possible interaction between PelD (soluble fractions: 111-455 and 176-455 amino acids) and PelF, as well as the tridimensional structure of PelF. For this, PelF and constructs of its glycosyl-transferase and DUF3492 domain were cloned in pET-SUMO vector. Purification protocols based on affinity chromatography, cleavage of 6xHis-SUMO tag with ULP1 enzyme and size exclusion chromatography were optimized. We have performed initial studies of crosslinking and size exclusion chromatography with the isolated proteins to investigate their oligomeric state and combining both proteins to study protein interaction. Those tests were done in presence and absence of c-di-GMP and crystallographic assays are already being done. Size exclusion chromatography showed that PelF adopts only a monomeric state. PelD constructs presented more than one oligomeric form. Conditions of interaction tests are being refined. In the crosslinking gel, the oligomer bands of PelD (111-455) presented a higher intensity than the bands of PelD (176-455), suggesting that the helix missing part of PelD (176-455) can influence on PelD oligomerization. Furthermore, the oligomeric form can interfere on the polymer translocation mechanism. Together with PelF structure, those data will help to elucidate this complex mechanism of Pel polysaccharide translocation, collaborating to future studies of drug development.

**Keywords:** Biofilm. Pel. c-di-GMP.

#### Referências:

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

2 FRANKLIN, M. J.; NIVENS, D. E.; WEADGE, J. T.; HOWELL, L. Biosynthesis of *Pseudomonas aeruginosa* extracellular polysaccharides, alginate, Pel and Psl. **Frontiers in Microbiology**, v. 2, n. 167, p. 1-16, 2011.

3 SILVA, S. S. **Estudos estruturais da proteína PelD de *Pseudomonas aeruginosa*: um receptor de c-di-GMP responsável pela produção de exopolissacarídeos e formação de biofilmes.** 2012. 124 f. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

## PG204

# NMR multi decay processing for well logging and laboratory applications

TREVIZAN, W. A.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>2</sup>

williantrevizan@petrobras.com.br

<sup>1</sup>Petrobras/ Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Low field Nuclear Magnetic Resonance techniques have become widely used in the oil industry for formation evaluation with well-log analysis. (1) Combined with other in situ measurements such as resistivity, sonic velocities, porosity, density, etc, NMR helps on the identification of oil and/or gas reservoirs, fluid volume quantification and permeability estimation. Most of NMR well log acquisition protocols use at some point concepts of the CPMG pulse sequence, which can be described briefly as follows: an applied static magnetic field  $B_0$  induces a net spin magnetization (from H nuclei for petroleum applications) in the formation; after a polarization build up time  $T_w$ , a radio frequency pulse tilts the magnetization to a direction transverse to  $B_0$ ; transverse magnetization decay to equilibrium is measured through the application of a series of refocusing rf pulses, which corrects  $B_0$  gradient effects and samples the decay with a sampling time  $T_e$ . The resulted decay can be inverted to a transverse relaxation time ( $T_2$ ) distribution, which correlates to petrophysical properties such as pore size distribution and free/bound fluid. Longitudinal relaxation times ( $T_1$ ) and fluids diffusion coefficient ( $D$ ) can be obtained by varying  $T_w$  and  $T_e$ , respectively. In order to optimize acquisition time preserving signal to noise ratio, NMR well logging tools acquire a set of decay data, each one measured with a different set of parameters ( $T_w$  and  $T_e$ ). The inversion process then needs to be adapted to handle with the diversity of input data and correct signal losses from incomplete magnetization. In this work we implemented a Laplace Inversion routine that takes these features into account, being able to invert both NMR log and laboratory data. With this processing routine in hand, laboratory experiments can be designed to match well log acquisition procedures, resulting in a most fair comparison between these data and providing a powerful tool for petrophysical evaluation. In order to continuously improve log and lab correlation new NMR probes are being developed in the scope of the project, that will be capable to reproduce reservoir temperature and pressure, and measure live oil. The most recent NMR techniques developed to porous media study will also be implemented and studied. (2-3)

**Keywords:** NMR. Porous media. Laplace inversion.

### Referências:

1 DUNN, K.J.; BERGMAN, D.J. LATORRACA, G.A. **Nuclear magnetic resonance:** petrophysical and logging applications. England: Elsevier Science, 2002.

2 SONG, Y.; ZIELINSKI, L.; RYU, S. Two-dimensional NMR of diffusion systems. **Physical Review**

**Letters**, v. 100, n.24, p. 248002-1-248002-4, 2008.

3 SONG, Y. Recent progress of nuclear magnetic resonance applications in sandstones and carbonate rocks. **Vadoze Zone Journal**, v. 9, n.4, p. 828-834, 2010.

## PG205

### Fluorescence correlation spectroscopy studies: Probing single protein inside cells

TSUTAE, F. M.<sup>1</sup>; MOREIRA, H. H. T.<sup>1</sup>; GUIMARAES, F. E. G.<sup>1</sup>

f.tsutae@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Fluorescence correlation spectroscopy (FCS) is one of the many different modes of high-resolution spatial and temporal analysis of extremely low concentrated biomolecules. It has become a powerful and sensitive tool in fields like biochemistry and biophysics. (1) As a well established technique, it is used to measure local concentrations of fluorescently labeled biomolecules, diffusion coefficients, kinetic constants and single molecule studies. It can also give precise information about interactions of antigen-antibody, nucleic acids and proteins. Through a combination of high quantum yield fluorescent dyes, stable light sources (lasers), ultrasensitive detection and confocal microscopy is possible to perform FCS measurements in femtoliters volumes and nanomolar concentrations in aqueous solution or in live cells. (2) In contrast to other fluorescence techniques, FCS sensibility increases with the decrease of fluorophore concentration, because the parameter of interest is not the emission intensity itself, but rather the spontaneous fluctuations of the intensity. During the time that a particle or molecule cross the target volume can occur conformational changes and chemical or photophysical reactions, that alter the emission characteristics of the fluorophore and cause additional fluctuations in the detected signal. The monitored fluorescence fluctuation signals are then transformed to an autocorrelation curve according to the autocorrelation software package and the curves are fitted to an appropriate physical model. In our study, we use commercial dyes (Alexa 488 and Alexa 499) to label proteins. We have performed experiments testing the influence of the viscosity medium in the free diffusion of the dyes and the optical apparatus and conditions that result in the best FCS signal. We also have studied protein diffusion toward the inner of the cells by the shift of the autocorrelation curve.

**Keywords:** Fluorescence correlation spectroscopy. Fluorescent dyes. Confocal microscopy.

#### Referências:

- 1 KRICHEVSKY, O.; BONNET, G. Fluorescence correlation spectroscopy: the technique and its applications. **Reports on Progress in Physics**, v. 65, n. 2, p. 251-297, 2002.
- 2 SCHWILLE, P.; HAUSTEIN, E. Fluorescence correlation spectroscopy: novel variations of an established technique. **Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure**, v. 36, p. 151-169, 2007. doi: 10.1146/annurev.biophys.36.040306.132612.



## PG206

# Investigação da interação entre nanopartículas metálicas e sistemas fotossintéticos

VALENTE, G. T.<sup>1</sup>; GUIMARAES, F. E. G.<sup>1</sup>

gtv@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Com os avanços no conhecimento das propriedades físicas e químicas das nanopartículas, importantes aplicações tecnológicas, tais como, aparelhos eletrônicos, cosméticos e tintas, estão sendo desenvolvidas.(1) Porém, as mesmas características das nanopartículas que produzem essas importantes aplicações podem produzir efeitos inesperados quando liberadas no meio ambiente. Estudos revelam que na presença de nanopartículas há uma redução da eficiência da fotossíntese de algas verdes *Chlamydomonas reinhardtii*.(2) Também, sabe-se que o estado eletrônico excitado de moléculas de clorofila é desativado pelas nanopartículas por meio do processo transferência de carga que pode afetar diretamente o processo de fotossíntese.(1) No entanto, ainda há pouca informação sobre como as nanopartículas interagem com células fotossintéticas bem como é a dinâmica das nanopartículas dentro dessas células. No estudo iniciado no segundo semestre de 2013 propomos a utilização da espectroscopia de correlação da fluorescência (FCS, do inglês *Fluorescence correlation spectroscopy*) para investigar a interação entre nanopartículas metálicas e células fotossintéticas (algas verdes e plantas). A técnica de FCS, que recentemente foi implantada no IFSC/USP, possui alta resolução temporal e espacial que a torna sensível o suficiente para analisar sistemas moleculares com baixas concentrações extremamente (entre nanomolar e micromolar). Com isso é possível investigar processos de difusão e de interações moleculares. Nesse trabalho são apresentados os detalhes da técnica FCS bem como os primeiros resultados com as nanopartículas metálicas.

**Palavras-chave:** Espectroscopia de correlação. Nanopartículas metálicas. Fotossistemas.

### Referências:

1 FALCO, W.F.; BOTERO, E.R.; FALCÃO, E. A.; SANTIAGO, E.F.; BAGNATO, V.S. and Caires, A. R.L. In vivo observation of chlorophyll fluorescence quenching induced by gold nanoparticles. **Journal of Photochemistry and Photobiology A: chemistry**, v. 225, n. 1, p.65-71, 2011.

2 PICCAPIETRA, F. **Colloidal stability of silver nanoparticles and their interactions with alga *Chlamydomonas reinhardtii***. 2012. 97 f. Tese (Doutorado em Ciências) - ETH ZURICH, Zurique, 2012.

## PG207

### Computação quântica adiabática usando qubits supercondutores

VARGAS, J. A.<sup>1</sup>; BRITO, F.<sup>1</sup>

juanvagra@ursa.ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Computadores quânticos, cuja unidade básica é um qubit (bit quântico), seriam capazes de realizar certas tarefas com muita mais eficiência que os computadores clássicos. Alguns dos diversos sistemas que podem conter estes qubits experimentalmente são: íons aprisionados; ressonância magnética nuclear em moléculas e sistemas ópticos quânticos. Por outro lado, as implementações de estado sólido tendem a ser mais práticas por herdarem vários desenvolvimentos já alcançados para a eletrônica usual. Sendo mais específicos, uma possível implementação seria a de qubits usando dispositivos supercondutores contendo junções Josephson com acoplamentos controlados. (1) Estas observações experimentais têm fomentado de maneira apreciável o uso destes sistemas para a computação quântica adiabática. (2) Portanto, tem-se como objetivo investigar teoricamente a implementação destes dispositivos supercondutores para o modelo de computação quântica adiabática, com foco na determinação de protocolos tolerantes a erros e da determinação do comportamento do gap mínimo como uma função do número de qubits usados na computação.

**Palavras-chave:** Qubits supercondutores. Teorema adiabático. Computação quântica adiabática.

#### Referências:

1 CLARKE, J.; WILHELM, F. K. Superconducting quantum bits . **Nature**, v. 453, p. 1031-1042, 2008. doi:10.1038/nature07128.

2 VAN DER PLOEG, S. H. W.; IZMALKOV, A.; GRAJCAR, M.; HUBNER, U.; LINZEN, S.; UCHAIKIN, S.; WAGNER, T.; SMIRNOV, A.; VAN DEN BRINK, A. M.; AMIN, M. H. S.; ZAGOSKIN, A. M.; IL'ICHEV, E.; MEYER, H. G. Adiabatic quantum computation with flux qubits: first experimental results . **IEEE Transactions on Applied Superconductivity**, v. 17, n. 2, p. 113-119, 2007 .

## PG208

### Quantitative analysis for the study of arts evolution

VIEIRA, V.<sup>1</sup>; SBRISSA, D.<sup>1</sup>; FABBRI, R.<sup>1</sup>; FONTOURA DA COSTA, L.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>

[vilson@void.cc](mailto:vilson@void.cc)

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

While many studies were performed for the analysis and classification of paintings and other Art venues, this study does not stop in the classification step. It extends an analysis method already applied to Music and Philosophy (1), representing the evolution of Painting as a time-series where relations like *opposition*, *skewness* and *dialectics* were measured quantitatively. For that, a corpus of paintings of 12 well-known artists from Baroque and Modern Art was analyzed. A set of 93 features was extracted and the features which most contributed to the classification of painters were selected. The projection space obtained from the features provided the basis to the analysis of measurements. This quantitative measures underlie revealing observations about the evolution of Painting styles, mainly when compared with other humanity fields already analyzed. While Music evolved guided by a master-apprentice tradition (high dialectics) and Philosophy by opposition, Painting presents another pattern: constant increasing skewness, low opposition between members of the same movement and opposition peaks in the transition between movements. A difference between Baroque and Modern movements are also observed in the projected "Painting space": while Baroque paintings are presented as an overlapped cluster, the Modern paintings presents minor overlapping and are disposed more scattered in the projection than Baroque. This finds basis in Arts history where Baroque painters were guided by traditional rules while Modern painters tended to "break" these rules and develop their own style.

**Keywords:** Pattern recognition. Arts. Feature extraction.

#### Referências:

1 VIEIRA, V.; FABBRI, R.; TRAVIESO, G.; OLIVEIRA JUNIOR, O.N.; FONTOURA COSTA, L. A quantitative approach to evolution of music and philosophy. **Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment**, v. 2012, n. 8, p. P08010, Aug. 2012. doi:10.1088/1742-5468/2012/08/P08010.

## PG209

### Armadilha 2D de potássio para produção e estudo de um condensado de duas espécies: Na/K

VIVANCO, F. A. J.<sup>1</sup>; PEÑAFIEL, E. E. P.<sup>1</sup>; PAIVA, R. R.<sup>1</sup>; KRUGER, A. L.<sup>1</sup>; THOMPSON, K. J.<sup>1</sup>; MAGALHÃES, K. M. F.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; COURTEILLE, P. W.<sup>1</sup>

franklinze@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Após nosso grupo ter demonstrado experimentalmente a Turbulência Quântica num superfluido composto de um condensado de Bose-Einstein (1), estamos agora planejando diversos estudos numa mistura de dois superfluidos. Neste sistema teremos conjugados um condensado de potássio (K) e outro de sódio (Na). Com este sistema duplo, pretende-se investigar a transferência de vorticidade de um para outro superfluido, bem como procurar investigar a transferência de turbulência. Para poder realizar este e inúmeros outros estudos, o primeiro passo será a realização do sistema experimental, que é composto de diversas partes. Com relação a parte do potássio, desenvolveremos uma armadilha 2D para produção de um fluxo frio de átomos de K (2), caracterizar este sistema e acoplá-lo com outro sistema de Na que está sendo desenvolvido em paralelo. Após tais montagens individuais, os sistemas serão acoplados para obter simultaneamente os condensados de Na e K. Após tais etapas, os estudos de produção de vórtices serão iniciados. Atualmente temos operado o MOT 3D de sódio carregado a partir do feixe frio advindo da configuração 2D. (3) Isto consiste no primeiro passo da condensação desta espécie, e em paralelo estamos desenvolvendo o que será o MOT de K em configuração 2D. Como passo prévio à produção de um condensado de sódio será comprada a eficiência de carga do MOT 3D quando carregado dese o MOT 2D e a partir de um desacelerador Zeemann.

**Palavras-chave:** Armadilha magneto óptica. Condensação de Bose-Einstein. Potássio.

#### Referências:

1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301-1-045301-4, July 2009.

2 CATANI, J.; MAIOLI, P.; DE SARLO, L.; MINARDI, F.; INGUSCIO, M. Intense slow beams of bosonic potassium isotopes. **Physical Review A**, v. 73, n. 3, p. 033415-1-033415-9, Mar. 2006.

3 LAMPORESI, G.; DONADELLO, S.; SERAFINI, S.; FERRARI, G. Compact high-flux source of cold sodium atoms. **Review of Scientific Instruments**, v. 84, n. 6, p. 063102-1-063102-7, June 2013.

## PG210

### Modelagem de grãos confinados em invólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem

VRECH, G.<sup>1</sup>; COSTA, L. F.<sup>1</sup>

gvrech@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física da São Carlos - USP

A formação de arcos, estruturas que promovem a anisotropia de forças dentro de um sistema (1), acontece corriqueiramente dentro de silos ou maquinaria agrícola. O presente trabalho propõe um modelo baseado em redes complexas (2) para modelar tal fenômeno. Utilizando protótipos que consistiam em 11 tipos diferentes de grãos confinados em cilindros, foram feitas imagens de tomografia computadorizada. (3) Métodos de imagens foram desenvolvidos sobre estas imagens tridimensionais, afim de inicialmente segmentar cada um dos grãos presentes, e então extrair propriedades físicas de cada um deles, como a massa, centro de massa e força a qual cada um está submetido. Utilizando estes dados foram construídas redes complexas, tomando como nós a posição do centro de massa de cada grão, e como ligação a força que este grão está submetido. Utilizando a propriedade strength da rede complexa é possível determinar qual dos grãos está submetido a uma força diferente dos grãos próximo, aqueles que participam da anisotropia que formam os arcos. É necessário para continuar o trabalho melhorar a resolução da imagem de entrada da tomografia computadorizada, acarretando em dados mais precisos para a formação da rede, assim como análise profunda das características de cada uma das redes formadas afim de caracterizar a formação dos arcos.

**Palavras-chave:** Redes complexas. Tomografia computadorizada. Processamento de imagens tridimensionais.

#### Referências:

- 1 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **SIAM Review**, v. 45, n. 2, p. 167-256, 2003.
- 2 JAEGER, H.; SHINBROT, T.; UMBANHOWAR, P. Does the granular matter?. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 97, n. 24, p. 12959-12960, 2000.
- 3 CRUVINEL, P. E.; PEREIRA, M. F. L.; SAITO, J. H.; COSTA, L. F. Performance improvement of tomographic image reconstruction based on DSP processors. **IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement**, v. 58, n. 9, p. 3295-3304, 2009.

## PG211

### Imagem de fluorescência usando filtro variável de cristal líquido em doenças de citros

WETTERICH, C. B.<sup>1</sup>; MARCASSA, L. G.<sup>1</sup>

caiovtrich@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O Laboratório de Interações Atômicas (LIA) da USP de São Carlos e o Fundecitrus têm desenvolvido em conjunto um projeto de aplicação de tecnologia fotônica para detecção de doenças em citros. Nesta etapa do projeto de doutorado utilizamos o sistema de imagens de fluorescência desenvolvido no período anterior para a seleção de bandas específicas das seguintes doenças: cancro cítrico, verrugose, deficiência de zinco, e greening. Sendo assim verificamos que as melhores bandas de emissão nas excitações em 405 e 470 nm para o cancro e a verrugose são 570, 630 e 690 nm, enquanto que para o greening e deficiência de zinco são 530, 580 e 690nm. Portanto, com as bandas de emissão e excitações selecionadas, realizamos a aquisição de imagens de fluorescência para 100 amostras de cada doença. Em seguida, aplicamos a técnica de Support Vector Machine (SVM) nestas imagens. Trata-se de uma técnica de aprendizado supervisionado que relacionam dados e reconhecimento de padrões, utilizando regressão e classificação.(1) Aplicamos a técnica SVM para dois grupos de imagens: i) Grupo 1, o qual compreendia as imagens de cancro e verrugose; ii) Grupo II, com as imagens de greening e deficiência de zinco. Esta separação se deve ao fato de que tínhamos problema em diferenciar cancro de verrugose, bem como greening de deficiência de zinco. Os resultados obtidos se mostram muito interessantes uma vez que para o Grupo 1 obtivemos uma acurácia de 93.5%, especificidade de 87% e sensibilidade de 100%, e para o Grupo 2 a acurácia foi de 94%, especificidade de 89.1% e sensibilidade de 100%. Todas as amostras de cancro cítrico e greening foram submetidas a testes de PCR para confirmar a contaminação. Os resultados aqui descritos estão sendo preparados para publicação.

**Palavras-chave:** Imagens de fluorescência. Support vector machine. Citros.

#### Referências:

1 SCHOLKOPF, B.; SMOLA, A. J. **A short introduction to learning with kernels**. Berlin/Heidelberg: Springer, 2003, p. 41-64.

## PG212

### Alternative numerical renormalization-group method in measuring the Kondo screening cloud

ZAWADZKI, K.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, L. N.<sup>1</sup>

krissia.zawadzki@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

In most metals, the resistivity is related to temperature variations, so that the resistivity increases (decreases) as we heat (freeze) the metal. Raising the temperature more and more vibrations of the metal nuclei are excited, yielding scattering processes of the conduction electrons that result in a resistivity increase. In 1934 the observation of a resistance minimum in gold puzzled physicists about the existence of a residual scattering process (in the absence of thermal excitation) due the presence of impurities, defects or vacancies in metallic materials and alloys. In 1964 Jun Kondo was able to describe in detail how the interaction between impurities and conduction electrons affects the resistivity and contributes to its increasing behavior  $\log(T)$  in very low temperatures. (1) Under low temperatures regime, the interaction gives rise to a dynamic polarized region around the impurity, known as *Kondo screening cloud*. Many researches tried to estimate the ratio of the cloud  $R_k$  by both theoretical and experimental approaches. (2) However, the divergence between the results did not allow to determine a definitive value for  $R_k$ . A possible explanation to these divergences lies in the notion that the cloud's ratio is always the same apart from geometry. We propose a method to estimate the size of the Kondo cloud in a dilute metallic alloy (a host metal with low concentration of impurities) with special geometry. We will consider a metallic host semi-infinite in the  $z$  direction with the impurity located at  $\vec{d}$  from the limiting plan. Then, we will study the longitudinal relaxation rate  $1/T_1$  of a probe as function of the temperature  $T$  and of its the distance  $R$  from the magnetic impurity. (3) We aim to find a dependence between the relaxation rate and the positions  $\vec{R}$  and  $\vec{d}$  providing information about the spacial structure of the Kondo screening cloud. The evaluation of such properties requires matrix elements of the basis operators, which is generally as expensive as the diagonalization of the model Hamiltonian. In order to solve numerically the problem, we will present an alternative procedure to the traditional *renormalization-group* method that is less time-consuming and equally accurate.

**Keywords:** Kondo effect. Renormalization-group method. Dilute magnetic alloys.

#### Referências:

- 1 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. **Progress in Theoretical Physics**, v. 32, n. 1, p. 37-49, 1964. doi: 10.1143/PTP.32.37.
- 2 BORDA, L. Kondo screening cloud in a one-dimensional wire: numerical renormalization group study. **Physical Review B**, v. 75, n. 4, p. 041307-1 014307-1, 2007. doi: 10.1103/PhysRevB.75.041307.
- 3 PINTO J. W. M., FROTA, H. O. ESR of a magnetic probe in the neighborhood of an Anderson



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP

impurity. **International Journal of Modern Physics B**, v. 24, p. 6185-6202, 2010. doi: 10.1142/S0217979210057638.



## PG213

### Structural and Functional characterization of *Schistosoma mansoni* septins

ZEIRAK, A. E.<sup>1</sup>; RINALDI, G.<sup>2</sup>; GARRATT, R. C.<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P.U.<sup>1</sup>; BRINDLEY, P. J.<sup>2</sup>; De MARCO, R.<sup>1</sup>

anaelizazeraik14@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Department of Microbiology, Immunology & Tropical Medicine, and Research Center for Neglected Tropical and Infectious Diseases, School of Medicine & Health Sciences, The George Washington University.

*Schistosoma mansoni* is one of the main causative agents of schistosomiasis, a neglected tropical disease affecting over 230 million people in developing and underdeveloped countries. The recent publication of its genome has enabled the identification of proteins and new potential drug targets (1). Septins are a family of GTPase proteins involved in a variety of cellular functions such as cytokinesis, vesicle trafficking, diffusion barriers, and scaffold. However, the mechanism by which septins participate in these processes is still poorly understood. The number of septin members is variable in different organisms, but the ability to self-assemble into hetero-oligomeric complexes that further polymerize into filaments is ubiquitous (2). We have identified four genes encoding septins in the *S. mansoni* genome, and three of them were co-expressed in heterologous system to produce a functional septin complex. The presence of the three proteins into the purified complex was assessed by SDS-PAGE and mass spectrometry. As far as we know, this is the first description of a septin complex in the platyhelminthes phylum. Immunolocalization assays were performed using anti-SmSEPT5 or anti-Smsept10 antibodies in different developmental stages of *S. mansoni* life cycle. Septins were found enriched in germ cells and in structures such as epidermal plates, muscle fibers and protonephridial canals, indicating the variety of cellular functions that septins might be involved. The plant growth regulator termed forchlorfenuron (FCF), a synthetic cytokinin molecule, is able to stabilize septin filaments in both yeast and mammalian cells, representing an informative tool to investigate septin function (3). The recombinant *S. mansoni* complex was incubated with FCF in vitro and a faster polymerization of septin filaments was verified, thus confirming the action of this compound in septin filaments. Surprisingly, schistosomes exhibited a striking paralysis in the presence of FCF, an effect which was reversible on removal of the compound. We hypothesize that a direct effect on muscle contraction due to septin stabilization might be responsible for the reversible paralysis, since enrichment of septins within the muscles of schistosomes was verified by us using immunolocalization. This first report on *S. mansoni* septins reveals the conserved structural properties of this family of proteins, the diversity of functions that they are involved and the striking effect of FCF on both schistosome motility and on septin polymerization. As such it contributes to the elucidation of the roles of septins in this important human parasite and opens up new possibilities for the exploitation of FCF and its derivatives as potential anti-schistosomal drugs.

**Keywords:** Septins. *Schistosoma mansoni*. Immunolocalization.

### Referências:

- 1 BERRIMAN, M. et al. The genome of the blood fluke *Schistosoma mansoni*. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 352-358, July 2009.
- 2 KINOSHITA, M. Assembly of Mammalian septins. **Journal of Biochemistry**, v. 134, n.4, p. 491-496, 2003.
- 3 HU, Q.; NELSON, W.J.; SPILIOTIS, E.T. Forchlorfenuron alters Mammalian septin assembly, organization, and dynamics. **Journal of Biological Chemistry**, v. 283, n.43, p. 29563-29571, 2008.

## Índice de Autores

### Symbols

|                   |    |
|-------------------|----|
| ÁVILA, O. I. .... | 66 |
|-------------------|----|

### A

|                           |                                       |
|---------------------------|---------------------------------------|
| ALCARAZ, F. C. ....       | 103, 155                              |
| ALMEIDA FILHO, H. A. .... | 45                                    |
| ALMEIDA, G. F. B. ....    | 46                                    |
| ALMEIDA, J. M. ....       | 150                                   |
| ALMEIDA, L. O. B. ....    | 160                                   |
| ALTEI, W. F. ....         | 47                                    |
| ALTMANN, E. ....          | 49                                    |
| AMANCIO, D. R. ....       | 49                                    |
| AMARAL, T. M. ....        | 50                                    |
| AMORIM, A. D. F. ....     | 86, 240                               |
| AMORIM, A. D. F. de ....  | 311                                   |
| AMORIM, D. R. B. ....     | 52                                    |
| AMOROSO, R. ....          | 279                                   |
| ANDRADE, C. T. ....       | 53                                    |
| ANDREETA, M. B. ....      | 55                                    |
| ANDRICOPULO, A. D. ....   | 47, 149, 179, 189, 200, 228, 322, 323 |
| ANGARITA, D. P. R. ....   | 259                                   |
| ANJOS, C. F. ....         | 27                                    |
| ANJOS, R. A. ....         | 56                                    |
| AOKI, P. H. B. ....       | 46                                    |
| ARAUJO, A. P. U. ....     | 118, 161, 205, 206                    |
| ARAUJO, A. P.U. ....      | 349                                   |
| ARGENTIN, M. N. ....      | 58                                    |
| ASCONA, C. R. ....        | 60                                    |
| ASSAF, E. M. ....         | 122                                   |
| ASSIRATI, L. ....         | 62                                    |
| AURICHIO, V. H. ....      | 63                                    |
| AVACA-CRUSCA, J. S. ....  | 118                                   |
| AYALA, A. P. ....         | 296                                   |
| AZEVÊDO, E. R. ....       | 120                                   |
| AZEVEDO, E. C. ....       | 64                                    |
| AZEVEDO, E. R. ....       | 83, 137, 305, 314                     |

### B

|                      |     |
|----------------------|-----|
| BACHELARD, R. ....   | 193 |
| BAFFA FILHO, O. .... | 53  |
| BAGNATO, G. G. ....  | 67  |
| BAGNATO, V. ....     | 286 |
| BAGNATO, V. S. ....  | 230 |

|                               |                                                                                                |
|-------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| BAGNATO, V. S. . . . .        | 31, 53, 76, 91, 128, 153, 167, 168, 244, 251, 259, 272, 276, 292, 295, 315, 327, 328, 332, 344 |
| BAGNATO, V.S; . . . . .       | 99                                                                                             |
| BAHRAMI, A. . . . .           | 69, 292, 328                                                                                   |
| BALLESTEROS, C. A. S. . . . . | 71                                                                                             |
| BARBANO, E. C. . . . .        | 72                                                                                             |
| BARBOSA, B. G. . . . .        | 73                                                                                             |
| BARBOSA, L. R. S. . . . .     | 257                                                                                            |
| BARDIVIESSO, L. G. . . . .    | 74                                                                                             |
| BARRETO, D. L. . . . .        | 76                                                                                             |
| BARROS, K. L. P. . . . .      | 160                                                                                            |
| BASSO, L. G. M. . . . .       | 77                                                                                             |
| BASTOS, C. M. O. . . . .      | 79                                                                                             |
| BELLINI, N. K. . . . .        | 80                                                                                             |
| BERGOC, I. . . . .            | 82                                                                                             |
| BERNARDI, M. I. B. . . . .    | 122, 135                                                                                       |
| BERNARDINELLI, O. D. . . . .  | 83                                                                                             |
| BIRD, L. . . . .              | 263                                                                                            |
| BONAGAMBA, T. J. . . . .      | 55, 60, 86, 144, 201, 221, 240, 282, 311                                                       |
| BONAGAMBA, T. J. . . . .      | 338                                                                                            |
| BORALII, C. M. S. . . . .     | 133                                                                                            |
| BORGES, J. C. . . . .         | 257                                                                                            |
| BOSSOLAN, N. R. S. . . . .    | 58, 74                                                                                         |
| BRANDÃO NETO, J. . . . .      | 263, 334                                                                                       |
| BRATIFICH, R. . . . .         | 85                                                                                             |
| BRAUD, A. . . . .             | 154                                                                                            |
| BRAZ, D. C. . . . .           | 86                                                                                             |
| BRAZACA, L. C. . . . .        | 88                                                                                             |
| BRINDLEY, P. J. . . . .       | 349                                                                                            |
| BRITO, F. . . . .             | 342                                                                                            |
| BRITO, F. B. . . . .          | 117                                                                                            |
| BRUNO, O. M. . . . .          | 45, 62, 165                                                                                    |
| BUENO, R. V. . . . .          | 89                                                                                             |
| BUZZA, H. H. . . . .          | 91                                                                                             |
| <br>C                         |                                                                                                |
| CAMARA, A. S. . . . .         | 93                                                                                             |
| CAMARGO, I. L. B. C. . . . .  | 196, 278                                                                                       |
| CAMILLO, C. M. . . . .        | 156                                                                                            |
| CAMILO, C. M. . . . .         | 170, 246                                                                                       |
| CAMPO, T. . . . .             | 95                                                                                             |
| CAMPOS, C. P. . . . .         | 96                                                                                             |
| CAMPOS, T. . . . .            | 79                                                                                             |
| CANCINO, J. . . . .           | 34                                                                                             |
| CANDIDO, D. R. . . . .        | 98                                                                                             |
| CANDURI, F. . . . .           | 257                                                                                            |
| CANEVAROLO, R.I R. . . . .    | 47                                                                                             |

|                             |                            |
|-----------------------------|----------------------------|
| CARACANHAS, M. A. ....      | 31, 315                    |
| CARACANHAS, M.A; ....       | 99                         |
| CARDOSO, A. R. ....         | 100                        |
| CARDOSO, M. R. ....         | 46                         |
| CARUSO, J. S. ....          | 102                        |
| CARVAJAL JARA, D. A. ....   | 103                        |
| CARVALHO JR, P. S. ....     | 105                        |
| CARVALHO, C. M. ....        | 106, 108                   |
| CARVALHO, M. M. ....        | 29                         |
| CASTILHO, P. ....           | 230                        |
| CASTILHO, P. ....           | 128                        |
| CASTRO NETO, J. C. ....     | 218, 287                   |
| CASTRO, L. A. de ....       | 110                        |
| CAVALCANTE, N. ....         | 111                        |
| CAVINI, Í. A. ....          | 112                        |
| CEZAR, H. M. ....           | 114                        |
| CHAMBERGO, F. S. ....       | 326                        |
| CHAVES, A. S. ....          | 115                        |
| CHERUBIM, C. F. ....        | 117                        |
| CHIARADIA, L. D. ....       | 47                         |
| CILLI, E. M. ....           | 77                         |
| CIOL, H. ....               | 118                        |
| COBO, M. F. ....            | 120                        |
| COELHO, F. B. ....          | 238, 299                   |
| COLETTA, V. C. ....         | 122                        |
| COLNAGO, LUIZ A. ....       | 203                        |
| COMIN, C. H. ....           | 124                        |
| CONSTANTINO, C. J. L. ....  | 46                         |
| CORA, J. E. ....            | 108                        |
| CORREA, D. S. ....          | 71                         |
| CORRER, W. ....             | 125                        |
| COSTA FILHO, A. J. ....     | 77                         |
| COSTA, L. ....              | 286                        |
| COSTA, L. F. ....           | 46, 49, 124, 141, 303, 345 |
| COURTEILLE, P. W. ....      | 199, 344                   |
| COURTEILLE, Ph. W. ....     | 193, 208                   |
| COUTINHO, D. J. ....        | 126                        |
| CRECZYNSKI-PASA, T. B. .... | 47                         |
| CRUSCA JÚNIOR, E. ....      | 77                         |
| CRUSCA, E. ....             | 205, 330                   |
| CRUSCA, J. S. A. ....       | 161, 206                   |
| CRUZ, A. R. ....            | 127                        |
| CUCCHIERI, A. ....          | 289                        |
| CUEVAS, F. J. P. ....       | 128, 153                   |
| CURVELO, A. A. S. ....      | 137                        |

|                               |                    |
|-------------------------------|--------------------|
| <b>D</b>                      |                    |
| D'EURIDYCE, M. N. ....        | 201                |
| DA SILVA, J. L. F. ....       | 249                |
| DA SILVA, M. T. A. ....       | 133                |
| DAGHESTANI, H. N. ....        | 47                 |
| DAY, B. W. ....               | 47                 |
| DE BONI, L. ....              | 150, 324           |
| DE GROOTE, M. C. ....         | 129                |
| DE MARCO, R. ....             | 163, 233           |
| De MARCO, R. ....             | 349                |
| DE SOUZA, V. ....             | 33                 |
| DeMARCO, R. ....              | 224                |
| DESSOY, M. A. ....            | 228                |
| DIAS, L. C. ....              | 228                |
| DIPOLD, J. ....               | 130                |
| DOMENEGUETI, J. F. M. ....    | 132, 220           |
| DONOSO, J. P. ....            | 307                |
| dos SANTOS, F. E. A ....      | 76                 |
| DUARTE, S. M. ....            | 228                |
| <b>E</b>                      |                    |
| E SILVA, I. R. ....           | 133                |
| ECKERT, H. ....               | 27                 |
| EGUES, J. C. ....             | 98                 |
| ELLENA, J. ....               | 105, 231, 296, 333 |
| ESCANHOELA JUNIOR, C. A. .... | 135                |
| ESCOLA, J. P. L. ....         | 136                |
| ESPIRITO SANTO, M. C. ....    | 137                |
| ESTRADA, R. A. ....           | 144                |
| ETCHEVERRY, S. B. ....        | 307                |
| EVANGELISTA, D. E. ....       | 138                |
| EVANGELISTA, J. P. ....       | 140                |
| Evelyn Winter ....            | 47                 |
| <b>F</b>                      |                    |
| FABBRI, R. ....               | 141, 343           |
| FARIA JUNIOR, P. E. ....      | 79, 95, 142        |
| FARIA, H. A. M. ....          | 143                |
| FARIA, R. M. ....             | 126                |
| FARIA, R. M. ....             | 52, 321            |
| Farias, K. M. ....            | 230                |
| FARIAS, K. M. ....            | 167, 328           |
| FEREIRA, E. C. ....           | 39                 |
| FERNANDES, T. V. A. ....      | 77                 |
| FERREIRA JÚNIOR, J. R. ....   | 194, 326           |
| FERREIRA, A. G. A. ....       | 144                |
| FERREIRA, G. R. ....          | 314                |
| FERREIRA, L. A. ....          | 63                 |

|                            |                             |
|----------------------------|-----------------------------|
| FERREIRA, R. S. ....       | 228                         |
| FERRI, F. A. ....          | 309                         |
| FIGUEIREDO, A. ....        | 146                         |
| FIGUEIREDO, E. B. ....     | 108                         |
| FIGUEREDO, T. R. ....      | 148                         |
| FIORAVANTI, C. M. ....     | 149                         |
| FONSECA, R. D. ....        | 150                         |
| FONTOURA DA COSTA, L. .... | 343                         |
| FORTULAN, C. A. ....       | 201                         |
| FRANCO, F. F. ....         | 30                          |
| FREIRE, G. ....            | 238                         |
| FREIRE, G. M. ....         | 299                         |
| FREIRE, R. L. H. ....      | 151                         |
| FRITSCH, A. ....           | 128                         |
| FRITSCH, A. R. ....        | 153                         |
| FUJITA, A. K. L. ....      | 259                         |
| G                          |                             |
| GALLO, I. B. ....          | 154                         |
| GARRATT, R. C. ....        | 111, 194, 326, 349          |
| GAVA, L. M. ....           | 257                         |
| GELETINA, J. C. A. ....    | 155                         |
| GERALDE, M. C. ....        | 168                         |
| GODOY, A. ....             | 246                         |
| GODOY, A. S. de ....       | 138, 156                    |
| GOMES JUNIOR, F. G. ....   | 183                         |
| GOMES, N. D. ....          | 31                          |
| GONÇALVES, L. F. ....      | 157                         |
| GONÇALVES, L. F. ....      | 166                         |
| GONÇALVES, M. R. ....      | 160                         |
| GOVONE, A. B. ....         | 158                         |
| GRECCO, C. ....            | 236, 244                    |
| GROSSI, C. H. F. ....      | 44                          |
| GUARIENTO, R. T. ....      | 160                         |
| GUIDO, R. C. ....          | 136, 245                    |
| GUIDO, R. V. C. ....       | 89, 149, 174, 180, 216, 262 |
| GUIMARÃES, F. E. G. ....   | 146                         |
| GUIMARAES, F. E. G. ....   | 340, 341                    |
| GUTIERREZ, R. F. ....      | 161                         |
| H                          |                             |
| HEEL, M. V. ....           | 291                         |
| HENN, E. A. de L. ....     | 328                         |
| HENN, E. A. L. ....        | 69, 292                     |
| HERNANDES, A. C. ....      | 50, 150, 256                |
| HONORATO, R. V. ....       | 257                         |
| HONORATO, S. B. ....       | 296                         |
| HORJALES, E. ....          | 284, 313, 330               |

|                          |                                                                      |
|--------------------------|----------------------------------------------------------------------|
| HOYOS NETO, J. A. ....   | 276                                                                  |
| HOYOS, J. A. ....        | 155                                                                  |
| I                        |                                                                      |
| INADA, N. M. ....        | 168, 295                                                             |
| J                        |                                                                      |
| JACINTO, D. S. ....      | 163                                                                  |
| JANEGITZ, B. C. ....     | 253, 277                                                             |
| JESUS, L. M. ....        | 164                                                                  |
| JORGE, A. E. ....        | 96                                                                   |
| JORGE, A. E. S. ....     | 259                                                                  |
| JUSTO, M. J. M. ....     | 165                                                                  |
| K                        |                                                                      |
| KALBITZER, H. R. ....    | 112                                                                  |
| KIEJNA, A. ....          | 151                                                                  |
| KILLIAN, T. C. ....      | 272                                                                  |
| KONDO, J. D. M. ....     | 157, 166                                                             |
| KROGH, R. ....           | 228                                                                  |
| KRUGER, A. ....          | 230                                                                  |
| KRUGER, A. L. ....       | 167, 344                                                             |
| KURACHI, C. ....         | 35, 37, 53, 91, 96, 158, 168, 236, 244, 251, 259, 272, 286, 295, 327 |
| KURTHS, J. ....          | 232                                                                  |
| L                        |                                                                      |
| LA SCALA JUNIOR, N. .... | 108                                                                  |
| LANG, R. G. ....         | 33                                                                   |
| LEDEMI, Y. ....          | 309                                                                  |
| LEITE, I. S. ....        | 168                                                                  |
| LIBERATO, M. V. ....     | 170                                                                  |
| LIMA JÚNIOR, J. D. ....  | 46                                                                   |
| LIMA, A. L. de ....      | 171                                                                  |
| LIMA, C. A. U. ....      | 173                                                                  |
| LIMA, G. M. A. ....      | 174, 216                                                             |
| LIMA, J. F. ....         | 77                                                                   |
| LIMA, M. A. ....         | 83, 137                                                              |
| LIMA, M. Z. T. ....      | 176                                                                  |
| LIMA, R. B. B. ....      | 178                                                                  |
| LINS, P. ....            | 34                                                                   |
| LOPES, J. L. S. ....     | 205                                                                  |
| LOURENÇO, G. V. ....     | 238, 299                                                             |
| M                        |                                                                      |
| M'PEKO, J. C. ....       | 164                                                                  |
| MACEDO, J. N. A. ....    | 205, 224                                                             |
| MAFUD, A. C. ....        | 227                                                                  |
| MAGALHÃES, K. M. F. .... | 344                                                                  |
| MAGALHÃES, L. G. ....    | 179                                                                  |



|                        |                           |
|------------------------|---------------------------|
| MAGALHAES, D. V        | 261                       |
| MAGON, C. J.           | 214, 307                  |
| MAIA, L. P.            | 29, 209, 282              |
| MALUF, F. V.           | 89, 180                   |
| MARANGONI, V. S.       | 30, 182, 253              |
| MARASSI, A. G.         | 183                       |
| MARCASSA, L. G.        | 157, 166, 346             |
| MARCELLO JUNIOR, H. B. | 196                       |
| MARCOMINI, J.          | 185                       |
| MAREGA JUNIOR, E.      | 76, 85, 167, 309, 318     |
| MARTIN NETO, L.        | 108                       |
| MARTINS, J. M.         | 74                        |
| MARTINS, M. J.         | 238, 299                  |
| MARTINS, R. J.         | 186                       |
| MASTELARO, V. R.       | 122, 135                  |
| MATIAS, P.             | 188                       |
| MATOS, K. S.           | 189                       |
| MATSUYAMA, B. Y.       | 191                       |
| MATTEI, B.             | 47                        |
| MATTO, S. R. I.        | 307                       |
| MAXIMO, C. E.          | 193                       |
| MEDEIROS, A. I.        | 168                       |
| MENDES, T.             | 289                       |
| MENDES, T. C. R.       | 198                       |
| MENDONÇA, C. R.        | 46, 66, 72, 148, 150, 186 |
| MENDOZA, E.            | 194                       |
| MENEZES, J. C. E.      | 127                       |
| MENEZES, P. F. C.      | 251                       |
| MENEZES, P. F. C.      | 259                       |
| MERCADO, W. R.         | 195                       |
| MERLO, T. P.           | 196                       |
| MESSADDEQ, Y.          | 309                       |
| MIGLORIA, A.           | 198                       |
| MIGUEZ, M. L.          | 199                       |
| MILORI, D. M. B. P.    | 108, 247                  |
| MILORI, D. M. B. P.    | 39                        |
| MIRANDA, P. B.         | 213, 254, 281             |
| MISOGUTI, L.           | 72, 186                   |
| MODA, T. L.            | 189                       |
| MONCORGÉ, R.           | 154                       |
| MONTANHA, E. A.        | 200                       |
| MONTRAZI, E. T.        | 201, 221                  |
| MORAES NETO, G. D.     | 82                        |
| MORAES, I.             | 140                       |
| MORAES, T. B.          | 203                       |
| MORAIS, S. T. B.       | 205                       |
| MOREIRA, H. H. T.      | 206, 340                  |

|                       |                        |
|-----------------------|------------------------|
| MORIM, M. A. S. ....  | 137                    |
| MORIYA, P. H. ....    | 208                    |
| MORIYAMA, L. T. ....  | 236                    |
| MOSQUEIRO, T. S. .... | 29, 209                |
| MOUSSA, M. H. Y. .... | 82, 178, 234, 269, 331 |
| MOUSSA, M. H.Y. ....  | 195                    |
| MUNIZ, H. dos S. .... | 210                    |
| MUNIZ, J. R. C. ....  | 176                    |
| MUNIZ, S. ....        | 128                    |
| MUNIZ, S. R. ....     | 153                    |
| MUNTE, C. E. ....     | 77, 112, 313, 330      |
| MURAKAMI, M. T. ....  | 257                    |

## N

|                           |                         |
|---------------------------|-------------------------|
| NAPOLITANO, R. de J. .... | 110                     |
| NASCIMENTO, A. S. ....    | 210, 227                |
| NASCIMENTO, O. R. ....    | 275, 307                |
| NATORI, W. M. H. ....     | 211                     |
| NAVARRO, M. V. A. S. .... | 100, 191, 267, 301, 336 |
| NETTLESHIP, J. ....       | 263                     |
| NICOLODELLI, G. ....      | 39                      |
| NOGUEIRA, A. R. S. ....   | 137                     |
| NOGUEIRA, M. S. ....      | 35                      |
| NUNES, R. J. ....         | 47                      |

## O

|                             |               |
|-----------------------------|---------------|
| OITICICA, P. R. A. ....     | 213           |
| OLIVA, G. ....              | 180, 228, 257 |
| OLIVEIRA JR, O. N. ....     | 49            |
| OLIVEIRA JUNIOR, I. S. .... | 144           |
| OLIVEIRA JUNIOR, M. ....    | 214           |
| OLIVEIRA JUNIOR, O. N. .... | 141, 200, 319 |
| OLIVEIRA, A. A. ....        | 216           |
| OLIVEIRA, A. O. ....        | 218           |
| OLIVEIRA, A. R. ....        | 220           |
| OLIVEIRA, E. L. ....        | 221           |
| OLIVEIRA, L. N. ....        | 249           |
| OLIVEIRA, L. N. ....        | 270, 347      |
| OLIVEIRA, R. ....           | 296, 333      |
| OLIVEIRA-SILVA, R. ....     | 221, 240      |
| ONCEBAY SEGURA, C. ....     | 223           |
| ONO, B. A. ....             | 37            |
| ORCIA, D. ....              | 224           |
| OWENS, R. ....              | 263           |

## P

|                   |     |
|-------------------|-----|
| PAIVA, F. F. .... | 225 |
| PAIVA, R. R. .... | 230 |

|                             |                                  |
|-----------------------------|----------------------------------|
| PAIVA, R. R. ....           | 344                              |
| PASCHOAL, A. M. ....        | 225                              |
| PASCUTTI, P. G. ....        | 77                               |
| PAULA, K. ....              | 227                              |
| PAULI, I. ....              | 228                              |
| PAVONI, J. F. ....          | 53                               |
| PEÑAFIEL, E. E. P. ....     | 167, 344                         |
| PEDROZO-PEÑAFIEL, E. ....   | 230                              |
| PENTEADO, P. H. ....        | 98                               |
| PEPINO, R. O. ....          | 231                              |
| PEREIRA, H. D. M. ....      | 263                              |
| PEREIRA, H. D. P. ....      | 42                               |
| PEREIRA, H. M. ....         | 334                              |
| PEREIRA, R. G. ....         | 211, 318                         |
| PEREIRA, R.G; ....          | 99                               |
| PERON, T. K. D. M. ....     | 232                              |
| PHILIPPSSEN, G. S. ....     | 233                              |
| PINTO, D. O. S. ....        | 234, 305                         |
| PINTO, R. D. ....           | 160                              |
| PIOTROWSKI, M. J. ....      | 115                              |
| PIRES, D. P. ....           | 178, 234                         |
| PIRES, L. ....              | 35, 37, 53, 236, 244             |
| PIZETTA, D. C. ....         | 238, 299                         |
| POLIKARPOV, I. ....         | 83, 137, 156, 170, 176, 246, 279 |
| POLLI, R. S. ....           | 201, 240                         |
| PORTUGAL, R. V. ....        | 64, 291                          |
| PRADO, R. R. ....           | 242                              |
| PRATAVIEIRA, S. ....        | 236, 244                         |
| PUSEP, Y. A. ....           | 73                               |
| Q                           |                                  |
| QUEIROZ, G. E. T. ....      | 245                              |
| R                           |                                  |
| RABELLO, G. C. ....         | 247                              |
| RAMIA, M. ....              | 246                              |
| RANULFI, A. C. ....         | 247                              |
| REBOREDO, E. H. ....        | 93, 129, 274                     |
| REDDIVARI, Y. ....          | 263                              |
| REGO, C. R. C. ....         | 249                              |
| REICHERT, D. ....           | 120                              |
| REQUENA, M. B. ....         | 251                              |
| RIBOVSKI, L. ....           | 253                              |
| RIMOLI, C. V. ....          | 254                              |
| RINALDI, G. ....            | 349                              |
| RIVERA, V. A. G. ....       | 309                              |
| RODITI, I. ....             | 144                              |
| RODRIGUES FILHO, U. P. .... | 214                              |

|                          |               |
|--------------------------|---------------|
| RODRIGUES, C. A. ....    | 46            |
| RODRIGUES, F. A. ....    | 41, 232       |
| RODRIGUES, J. E. F. .... | 256           |
| RODRIGUES, N. C. ....    | 257           |
| RODRIGUES, P. G. S. .... | 259           |
| RODRIGUEZ, S. A. ....    | 261           |
| RODRIGUEZ, V. K. T. .... | 262           |
| ROMANELLO, L. ....       | 263           |
| ROMANO, R. A. ....       | 39            |
| RONDINA, G. G. ....      | 114, 115, 264 |
| RONQUI, J. R. F. ....    | 266           |
| ROSSETO, F. R. ....      | 267           |
| ROSSETTI, R. F. ....     | 269           |
| RUGGIERO, C. A. ....     | 293           |
| RYBSKI, D. ....          | 49            |

|                             |          |
|-----------------------------|----------|
| S                           |          |
| SAALWAECHTER, K. ....       | 120      |
| SABINO, F. P. ....          | 270      |
| SABINO, L. G. ....          | 272      |
| SALCEDO, D. L. P. ....      | 274      |
| SALES, A. I. L. ....        | 228      |
| SALINA, A. C. G. ....       | 168      |
| SALUM, L. de B. ....        | 47       |
| SALVIO, A. G. ....          | 286      |
| SANTANA, V. T. ....         | 275      |
| SANTOS, A. C. ....          | 276      |
| SANTOS, C. H. ....          | 108      |
| SANTOS, E. A. ....          | 180      |
| SANTOS, E. R. dos ....      | 41       |
| SANTOS, F. A. ....          | 253, 277 |
| SANTOS, F. E. A. ....       | 332      |
| SANTOS, J. ....             | 278      |
| SANTOS, J. C. ....          | 279      |
| SANTOS, J. C. C. ....       | 281      |
| SANTOS, J. F. ....          | 146      |
| SANTOS, M. L. ....          | 282      |
| SANTOS, V. A. R. dos ....   | 284      |
| SANTOS-SILVA, M. C. ....    | 47       |
| SARTHOUR JUNIOR, R. S. .... | 144      |
| SBRISSA, D. ....            | 343      |
| SBRISSA, D. A. ....         | 286      |
| SCADUTO, L. C. N. ....      | 218, 287 |
| SCHNEIDER, J. F. ....       | 214      |
| SCORTECCI, J. F. ....       | 42       |
| SECHINI, M. N. ....         | 47       |
| SELEGHIM JUNIOR, P. ....    | 137      |

|                             |                         |
|-----------------------------|-------------------------|
| SERENONE, W. M. ....        | 289                     |
| SERRÃO, V. H. B. ....       | 42, 291                 |
| SHIOZAKI, R. F. ....        | 292, 328                |
| SILVA da, D. C. ....        | 247                     |
| SILVA da, J. T. B. ....     | 247                     |
| SILVA JUNIOR, J. T. ....    | 293                     |
| SILVA, A. P. da ....        | 295                     |
| SILVA, C. C. P. ....        | 231, 296                |
| SILVA, C. M. P. ....        | 298                     |
| SILVA, C. R. ....           | 180                     |
| SILVA, D. M. D. D. ....     | 299                     |
| SILVA, D. M. D. D. da ....  | 238                     |
| SILVA, E. E. D. ....        | 301                     |
| SILVA, F. N. ....           | 303                     |
| SILVA, I. A. ....           | 305                     |
| SILVA, I. D. A. ....        | 307                     |
| SILVA, I. R. ....           | 80                      |
| SILVA, J. L. F. ....        | 114, 151, 264, 270      |
| SILVA, J. L. F. da ....     | 115                     |
| SILVA, L. F. ....           | 135                     |
| SILVA, L. V. ....           | 91                      |
| SILVA, M. T. A. da ....     | 80, 171                 |
| SILVA, O. B. ....           | 309                     |
| SILVA, R. de O. ....        | 311                     |
| SILVA, R. J. M. ....        | 27                      |
| SILVA, R. M. A. A. ....     | 313                     |
| SILVA, R. O. ....           | 201                     |
| SILVA, R. S. ....           | 164                     |
| SILVA, U. B. ....           | 314                     |
| SIPAHI, G. M. ....          | 79, 95, 142             |
| SIQUEIRA JUNIOR, J. R. .... | 319                     |
| SIQUEIRA, J. P. ....        | 186                     |
| SLAETS, J. F. W. ....       | 188                     |
| SMAIRA, A. F. ....          | 315                     |
| SOARES, P. M. S. B ....     | 316                     |
| SOARES-PINTO, D. O. ....    | 178, 221, 223, 282, 316 |
| SOBREIRA, F. W. A. ....     | 318                     |
| SOUZA, M. A. M. ....        | 319                     |
| SOUZA, W. da S. ....        | 321                     |
| SOUZA, A. A. ....           | 201, 240                |
| SOUZA, A. A. de ....        | 311                     |
| SOUZA, A. S. ....           | 322                     |
| SOUZA, C. ....              | 47                      |
| SOUZA, G. E. ....           | 133                     |
| SOUZA, G. R. ....           | 272                     |
| SOUZA, M. L. ....           | 323                     |
| SOUZA, M. L. de ....        | 228                     |

|                             |                   |
|-----------------------------|-------------------|
| SOUZA, M. M. ....           | 64                |
| SOUZA, T. G. B. ....        | 324               |
| SOUZA, V. ....              | 56, 130, 185, 242 |
| STELMASTCHUK, L. B. F. .... | 194, 326          |
| STRINGASCI, M. D. ....      | 327               |

**T**

|                        |                            |
|------------------------|----------------------------|
| TANNÚS, A. ....        | 299                        |
| TANNUS, A. ....        | 183, 238, 298              |
| TAVARES, P. E. S. .... | 292, 328                   |
| TEIXEIRA, F. B. ....   | 330                        |
| TEIZEN, V. F. ....     | 331                        |
| TELES, R. P. ....      | 332                        |
| TELLES, G. D. ....     | 292, 328                   |
| TENORIO, J. C. ....    | 333                        |
| TEODORO, M. C. ....    | 44                         |
| TERESHCHUK, P. ....    | 249                        |
| THIEMANN, O. H. ....   | 64, 80, 133, 140, 171, 291 |
| THOMPSON, K. J. ....   | 230                        |
| THOMPSON, K. J. ....   | 167, 344                   |
| TONIN, Y. R. ....      | 328                        |
| TORINI, J. ....        | 263                        |
| TORINI, J. R. ....     | 334                        |
| TORRES, N. U. ....     | 336                        |
| TRAVIESO, G. ....      | 67, 102, 266, 286, 343     |
| TREVIZAN, W. A. ....   | 338                        |
| TSUTAE, F. M. ....     | 340                        |

**V**

|                         |                        |
|-------------------------|------------------------|
| VALENTE, G. T. ....     | 341                    |
| VANZELLA, D. A. T. .... | 173                    |
| VARGAS, J. A. ....      | 342                    |
| VERCIK, A. ....         | 319                    |
| VICENTE, E. F. ....     | 77                     |
| VIDOTO, E. G. ....      | 238                    |
| VIDOTO, E. L. G. ....   | 86, 221, 240, 299, 311 |
| VIEIRA, N. C. S. ....   | 146                    |
| VIEIRA, V. ....         | 343                    |
| VILLAS BOAS, P. R. .... | 247                    |
| VILLAS BOAS, P.R. ....  | 39                     |
| VIVANCO, F. A. J. ....  | 167, 344               |
| VIVANCO, F. J. ....     | 230                    |
| VIVAS, M. G. ....       | 148                    |
| VOGT, A. ....           | 47                     |
| VOSS, T. ....           | 186                    |
| VRECH, G. ....          | 345                    |

**W**

|                         |            |
|-------------------------|------------|
| <b>WALMSLEY, L.</b>     | <b>275</b> |
| <b>WETTERICH, C. B.</b> | <b>346</b> |
| <b>WHITTEN, D.</b>      | <b>254</b> |

**Y**

|                      |           |
|----------------------|-----------|
| <b>YUINES, R. A.</b> | <b>47</b> |
| <b>YUNES, J. A.</b>  | <b>47</b> |

**Z**

|                       |                                                          |
|-----------------------|----------------------------------------------------------|
| <b>ZÍLIO, S. C.</b>   | <b>72, 220</b>                                           |
| <b>ZANATTA, A. R.</b> | <b>154, 309</b>                                          |
| <b>ZAWADZKI, K.</b>   | <b>347</b>                                               |
| <b>ZEIRAK, A. E.</b>  | <b>349</b>                                               |
| <b>ZILIO, S. C.</b>   | <b>132</b>                                               |
| <b>ZUCOLOTTO, V.</b>  | <b>30, 34, 71, 88, 106, 125, 143, 146, 182, 253, 277</b> |
| <b>ZUTIC, I.</b>      | <b>142</b>                                               |



SIFSC 3, 30 de setembro a 04 de outubro de 2013, São Carlos — SP



RESUMOS DOS WORKSHOPS DE  
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO

**SIFSC**.IFSC.USP.BR

*APOIO:*



SBI ifsc



IFSC

