

Nona Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Monday 05 August 2019 - Friday 09 August 2019

Book of Abstracts

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

Subárea:

Física Computacional e Simulações Numéricas **Apresentação do trabalho acadêmico para o público geral:**

Não Referências:

1 CLERMAN, N. S.; SPECTOR, W. **Modern Fortran: style and usage**. New York: Cambridge University Press, 2011.

2 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. **Matrix computations**. 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013.

3 MEYER, C. **Matrix analysis and applied linear algebra**. Philadelphia: SIAM, 2000. **Área:**

Física Aplicada a Computação

129

In vitro assessment of photodynamic therapy using nanoparticles carrying PpIX

Ilaíali Souza Leite¹ ; Juan Luis Vivero-Escoto² ; Zachary Lyles² ; Gabriela Mayr Reyes³ ; Juliana Cancino-Bernardi⁴ ; Natalia Mayumi Inada⁵

¹ 1São Carlos Institute of Physics, University of São Paulo, Group of Optics

² 2University of North Carolina-Charlotte, Department of Chemistry

³ 3São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo

⁴ 4Chemistry Institute, Federal University of Alfenas

⁵ 5 São Carlos Institute of Physics, University of São Paulo, Group of Optics

Corresponding Author(s): ilaiali.leite@usp.br, nataliainada@ifsc.usp.br

The research of light's interaction with a photoactive substance to promote cellular death was initially introduced by Oscar Raab in the late 1800s. (1) Since then, this technique – photodynamic therapy (PDT) – has been proposed to treat a wide range of maladies, from infectious illnesses to noncommunicable diseases, including cancer. Although it can be prescribed to treat precancerous lesions and some types of cancer, inefficient photosensitizer buildup at treatment site hampers PDT's efficacy. Nanotechnology has been addressing drug delivery problems by the development of distinct nanostructured platforms capable of increasing pharmacological properties of molecules, such as solubility and circulating half-life. (2) The association of nanotechnology's potential to enhance photosensitizer delivery to target tissues with PDT's oxidative damage to induce cell death has been

rising as prospect to optimize cancer treatment. In this study, we aim to verify and compare the efficiency of PDT using redox-responsive silica-based nanoparticles and membrane fusogenic liposomes (MFLs) carrying protoporphyrin IX (PpIX) in vitro, in both tumor and healthy cells. Four polysilsesquioxane-PpIX nanoparticles were studied: silica and PpIX (Ctrl-PpIX-SiNps), the previous system containing a redox-responsive linker that can be broken under reducing environments usually found in cancer cells (RR-PpIX-SiNps), a RR-PpIX-SiNps functionalized with polyethylene glycol (PEG, PEG-RR-PpIX-SiNps) and PEG-RR-PpIX functionalized with folic acid (FA- PEG-RR-PpIX-SiNps). MFLs were synthesized with (MFL-PpIX) and without (MFL) the photosensitizer. Cytotoxicity was evaluated in healthy (human fibroblasts – HDFn cell line - and keratinocytes - HaCaT) and tumor cells (MCF-7 – human mammary carcinoma, B16-F10 – murine skin melanoma and A431 – human skin non-melanoma). Dose-response experiments revealed the higher susceptibility of B16-F10 cell line to PDT than HDFn cells: when incubated for 24 h with 50 µg/mL of nanoparticles, the viability of B16-F10 cells was reduced to approximately 20 %, while similar results were obtained in HDFn cultures when solutions over 150 µg/mL were used. The comparison of PDT effectiveness between nanostructured and free PpIX revealed that, when exposed to RR-PpIX-SiNps, MCF-7 and A431 cells were more prone to PDT cytotoxic effects than the HaCaT cell line. Free PpIX, however, displayed high phototoxicity for MCF-7, A431 and HaCaT cells, inducing more than 90 % of cellular death in both cell lines. When melanoma cells (B16-F10) and fibroblasts (HDFn) are incubated for 24 hours with a final concentration of 1,5-15 µg/mL of MFL-PpIX, it was observed that B16-F10 internalize more PpIX than HDFn however both cell lines display the same viability reduction when irradiated with 50 J/cm² of 630 nm. The increased uptake of PpIX in tumor cells results in higher ROS production. When comparing the MFL-PpIX effect on cell viability to free PpIX, it was observed that, for both cell lines, the nanostructured photosensitizer presented lower cytotoxicity in the dark, but promoted the similar damage to the cells when PDT was performed with 50 J/cm². Further assays will evaluate mitochondrial membrane potential, apoptosis and necrosis rates, and the MFL-mediated PDT in non-melanoma skin cancer.

Subárea:

Óptica e Lasers **Apresentação do trabalho acadêmico para o público geral:**

Não Referências:

1 ABDEL-KADER, M. H. The journey of PDT throughout history: PDT from Pharos to present. In: KOSTRON, H.; HASAN, T. (ed.). **Photodynamic medicine: from bench to clinic**. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2016. cap. 1. p. 1-21. (Comprehensive Series in Photochemical and Photobiological Sciences)

2 SHI, J. et al. Nanotechnology in drug delivery and tissue engineering: from discovery to applications. **Nano Letters**, v. 10, n. 9, p. 3223-3230, 2010. **Área:**

Física Aplicada a Biomolecular

314

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

Giulia Kassab¹ ; Johan Sebastian Diaz Tovar¹ ; Samara Schultz Silva² ; Natalia Mayumi Inada¹ ; Cristina Kurachi¹ ; Vanderlei Salvador Bagnato¹

¹ IFSC-USP

² UNICEP, IFSC-USP

Corresponding Author(s): giulia.kassab@usp.br

A pneumonia é uma das principais causas de morte no mundo, especialmente em menores de 5 anos e maiores de 60, e é causada majoritariamente por bactérias. Diante da dificuldade em desenvolver e aprovar novos antibióticos, e da velocidade na qual surgem cepas resistentes a eles, se faz necessária a busca por tratamentos eficazes, seguros, e que não gerem resistência microbiana. A inativação fotodinâmica (IFD) de micro-organismos se apresenta como uma excelente alternativa, já que desde sua descoberta em 1900 não foram descritas observações de desenvolvimento de resistência a ela. Desde 2013, o nosso grupo de pesquisa estuda a aplicabilidade da IFD no tratamento da pneumonia bacteriana, utilizando o fotossensibilizador indocianina verde (ICV) e ativação extracorpórea com luz