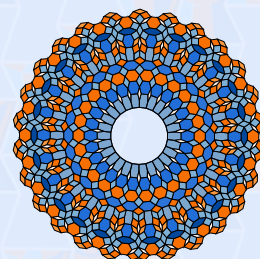
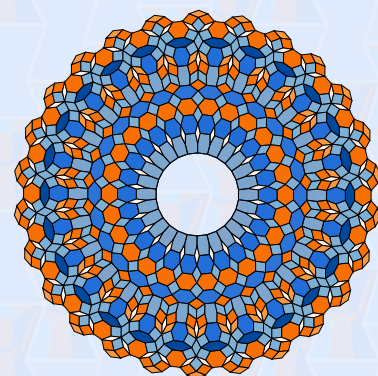
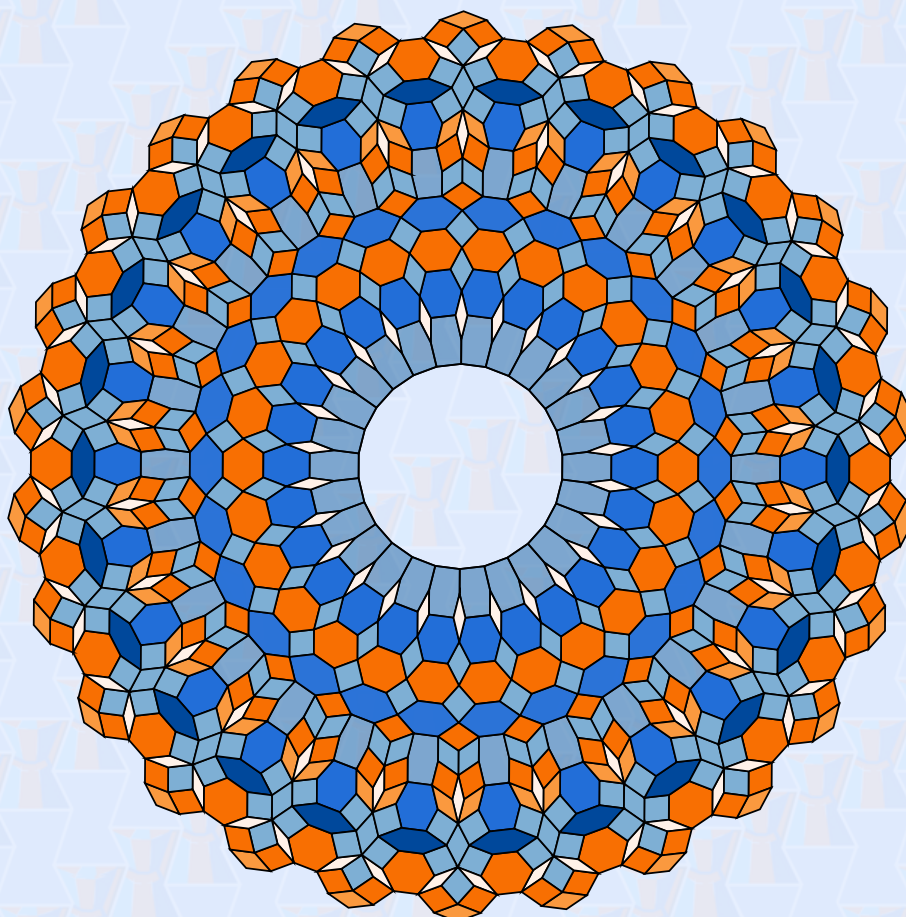


SIFSC

13

Livro de resumos 2023



Universidade de São Paulo Instituto de Física de São Carlos

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

13^a edição

Livro de Resumos

São Carlos
2023

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 13

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

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

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

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

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

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

Comissão Organizadora

Adonai Hilário da Silva

Ana Clara Sampaio Pimenta

Andressa Colaço

Arthur Deponte Zutião

Artur Soares Rodrigues

Claudio Alves Pessoa Junior

Elisa Ianh Goettems

Gabriel Capelo Domingues

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

João Victor Alcantara Pimenta

Júlia Marcolan Teixeira

Júlia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Murillo Gregorio Grefener da Silva

Naruna Esselin Rodrigues

Natasha Mezzacappo

Paulina Rossi Ferreira

Paulo Nunes de Souza

Pedro Ammon Liszt Rocha de Moura Palumbo

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Célia Maria Diegues

Luciana Aparecida Brasil Martinez

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Tania Ortin de Almeida

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(13: 21-25 ago.: 2023: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XIII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo / Organizado por Adonai Hilário da Silva [et al.]. São Carlos: IFSC, 2023.
358p.

Texto em português.

1.Física. I. Silva, Adonai Hilário da, org. II. Título.

ISSN: 2965-7679

Carta de apresentação

Já em sua décima terceira edição, a Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos - SIFSC, organizada por alunos de graduação e pós-graduação, com apoio da diretoria e de todos os servidores do instituto, promove como sempre atividades acadêmicas e culturais, garantindo a integração de toda a comunidade. São oferecidas palestras acadêmicas, mesas redondas e também espaço para a comunidade expor seu lado artístico-cultural.

Como de costume, uma das principais atrações da SIFSC é o Workshop da Pós-Graduação, já em sua 27ª edição, incluído no evento em 2011. Além de apresentações da Pós-Graduação, alunos de iniciação científica também podem apresentar seus trabalhos. Durante o Workshop, todos os estudantes são avaliados por professores e pós-doutorandos da área, a fim de acompanhar a evolução em seu projeto. O Workshop é de extrema importância na avaliação da CAPES, em que o instituto mantém nível de excelência por diversos anos.

Não sendo apenas de cunho acadêmico, o evento também serve como uma interface dos estudantes com o mercado de trabalho fora da universidade. Estimamos a participação de em torno de 400 pessoas, além de palestrantes, representantes de empresas e avaliadores. Esta interface, assim, se torna fundamental para ambos os lados, visto a quantidade de parcerias do instituto com empresas privadas.

Todos os alunos do instituto interessados poderão concorrer uma vaga no prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas, nomeado em homenagem a uma das pioneiras da física em São Carlos, em que serão prestigiados os melhores trabalhos de cada etapa: graduação, mestrado e doutorado. Após uma fase preliminar, os trabalhos são apresentados a uma banca com representantes de todas as grandes áreas de pesquisa do instituto.

Toda a Comissão Organizadora agradece a diretoria do IFSC-USP, a Comissão de Graduação e a Comissão de Pós-Graduação pelo apoio. Agradecemos também a todos os avaliadores e palestrantes, sem os quais o evento não seria possível. Agradecemos a presença de todos os participantes. Agradecemos especialmente as bibliotecárias do instituto, que dedicam árduo trabalho e esforço na padronização e adequação do livro de resumos.

Comissão Organizadora da SIFSC 13

SUMÁRIO

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Dark matter spike and gamma-ray boost around the black hole at the Galactic Center	
VIANA, A. ; SILVA, M. G. G.	27
IC2 - Preparação e caracterização de vidros fosfatos de íons alcalinos e alcalinos terrosos	
FERREIRA, M. J. ; SCHNEIDER, J. F. ; MORGUETTO, G. F.	28
IC3 - Estudo da interação do coiled-coil de septinas Cdc3-Cdc12 com peptídeos de proteínas Gic	
SILVEIRA, P. M. M. ; CAVINI, Í. A. ; ARAÚJO, A. P. U.	29
IC4 - Ressonância magnética nuclear em estado sólido para o estudo de sílica organicamente modificada dopada com complexos organometálicos luminescentes.	
OLIVEIRA JUNIOR, M. ; OYAMA, Y. K.	31
IC5 - Desvio da transição de Condensado de Bose-Einstein na presença de uma segunda espécie	
CASTILHO, P. C. M. ; GASPAR, P. M.	32
IC6 - Produção de guias de onda volumétricas com pulsos de femtossegundos	
TRANZIL, V. T. R. ; MENDONÇA, C. R.	33
IC7 - Dinâmica de grupos casuais	
SANCHES, M. A. ; FONTANARI, J. F.	35
IC8 - Estudos sobre a mobilidade da interface NC em septinas	
GARRATT, R. C. ; RITS, C. A. ; ARAÚJO, A. P. U.	36
IC9 - Aplicação de paclitaxel nanoencapsulado com PLGA no tratamento de câncer de pulmão	
BARBOSA, L. V. S. ; LEITE, C. M. ; RODERO, C. F. ; LEITE, A. E. T. ; ZUCOLOTTO, V.	38
IC10 - Lactonas ativas em linhagem tumoral metastática de mama	
RAFAEL, L. D. D. ; SOUZA, M. S. ; COELHO, F. A. S. ; ANDRICOPULO, A. D. ; SILVA, T. S. ..	39

IC11 - Estudos de taxa de troca molecular entre poros multiescala de rochas reservatório BONAGAMBA, T. ; CAMPOS, N. ; MARASSI, A.	41
IC12 - Cooperação e competição na evolução pré-biótica FONTANARI, J. F. ; MARIANO, M. S.	43
IC13 - Cadeia de Kitaev acoplado a um ponto quântico COSTA, G. F. ; MENEZES, J. C. E. ; PENTEADO, P. H.	44
IC14 - Desenvolvimento de nanoestruturas de g-C₃N₄ à partir da pirólise da ureia: estudo da atividade fotocatalítica para geração de H₂ verde MARCELINO, G. B. S. ; GONÇALVES, R. V.....	45
IC15 - Dinâmica de fluidos computacional em aneurisma cerebral utilizando imagens angiográficas DERRICO, F. F. ; PAIVA, F. F. ; SOLCIA, G.	46
IC16 - Seleção de grupo: entendendo o conflito entre o bem coletivo e o interesse individual FONTANARI, J. F. ; ZAMPRONIO, A. A. V.....	47
IC17 - O método variacional de Monte Carlo aplicado a bósons interagentes aprisionados em uma armadilha harmônica MADEIRA, L. ; KÜL, J. O.	48
IC18 - Simetrias e interações fundamentais: uma introdução às teorias de Yang-Mills SILVA, C. A. ; FERREIRA, L. A.	49
IC19 - Estudo de correlações temporais em átomos frios FRITSCH, A. R. ; BAGNATO, V. S. ; ARMIJOS, M. A. M. ; SILVA, L. L.	50
IC20 - Avaliação dos efeitos da luz UV-C sobre a espécie vegetal <i>Allium cepa</i> SOUZA, M. ; GARBUIO, M. ; INADA, N. M. ; SAMMARRO, K. J. ; BAGNATO, V. S. ; LIMA, A. R.	51
IC21 - Magnetization processes in frustrated magnets ANDRADE, E. C. ; DOMINGUES, G. C.....	53
IC22 - Avaliação de compostos em patógenos bacterianos multirresistentes como parte do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar) CAMARGO, I. L. B. C. ; ARGENTIN, M. N. ; CANDIDO, V. T.	54

IC23 - ¹H time domain NMR as a toll for probing distribution of metal ions adsorbed in modified sugar-cane bagasse bioadsorbents FILGUEIRAS, J. G. ; GURGEL, L. V. A. ; GARCIA, R. H. S. ; AZEVÊDO, E. R. ; MENDES, S. C. ; MAIA, L. C. ; CARVALHO, M. M. C. E.	56
IC24 - Dados intransitivos PIMENTA, J. V. A. ; LIMA, L. V. ; BUENO, L. G. C. ; UNGARETTI, D. ; SILVA, G. L. F. ; FRANCO, T. F. S. ; PAULA, J. P. C.	57
IC25 - Desenvolvimento de nanopartículas de PLGA encapsuladas com bevacizumabe para terapia do carcinoma pulmonar ZUCOLOTTO, V. ; SUZUKI, I. ; RODERO, C. F. ; PEREIRA, M. V. S.	58
IC26 - Estudo das propriedades ópticas de estruturas plasmônicas usando simulação numérica MAREGA JUNIOR, E. ; MARCOS, V. B.	60
IC27 - Estudo da terapia fotodinâmica antimicrobiana em modelo alveolar Transwell KASSAB, G. ; VICENTE, M. L. F. ; TOMÉ, A. J. B. ; KURACHI, C.	61
IC28 - Order-disorder effects and self-activated photoluminescence in hydroxyapatite nanoparticles via impurities incorporation MAZUERA, A. M. ; PACÍFICO, L. G. ; ZUCOLOTTO, V. ; VILELA, R. R. C. ; MACHADO, T. R.	63
IC29 - Novas quimioterapias citotóxicas para o câncer de mama metastático AFONSO, M. ; SOUZA, M. S. ; RAFAEL, L. D. D. ; MASS, E. B. ; RUSSOWSKY, D. ; ANDRICOPULO, A. D.	65
IC30 - Quantificação de espécies reativas de oxigênio produzidas por moléculas orgânicas em reações sonodinâmicas OLIVEIRA JUNIOR, M. ; PRATAVIEIRA, S. ; AYALA, E. T. P. ; SOUZA, M. O.	67
IC31 - Caracterização morfológica de esferóides derivados de linhagem celular de hepatocarcinoma humano MIRANDA, R. R. ; LEITE, C. M. ; ZUCOLOTTO, V. ; BARRIOS, N. L.	69
IC32 - Avaliação das componentes de perfusão e difusão obtidas com a técnica de Ressonância Magnética IVIM SOLCIA, G. ; PAIVA, F. F. ; SENA, R.	70
IC33 - ¹³C Solid-State NMR associated with multivariate analysis to study degradation of natural. organic matter AZEVEDO, E. R. ; GARCIA, R. H. S. ; BARCOTO, M. O. ; SOARES, J. G. S. ; RODRIGUES, A.	71

IC34 - 3D printing and characterization of an alginate-gelatin hydrogel soaked in low molecular weight chitosan for application in burns treatment CASTRO NETO, J. C. ; TENDULINI, A. J. G.	72
IC35 - Probing mobility constrains in polymers using ^1H double quantum time domain NMR as a method to investigate thermal, chemical or environmental degradation effects LIMA, A. P. ; CHAVES, E. G. ; HONORATO, H. A. ; SILVA, A. H. M. F. T. ; TEIXEIRA, S. C. S. ; GARCIA, R. H. ; MENEZES, S. M. C. ; OLIVEIRA, J. E. ; LAZARI, M. P. ; AZEVÊDO, E. R.	74
IC36 - Interação de agentes antimicrobianos com modelos de membrana celular investigada através de espectroscopia vibracional e microscopia BICEGO, J. R. P. ; MIRANDA, P. B.	75
IC37 - Informação quântica via ressonância magnética nuclear LOURENÇO, Y. C. ; FERREIRA, A. G. A.	77
IC38 - Caracterização estrutural das diferente isoformas da pulchellina MÜNDEL, V. ; MUNIZ, J.	78
IC39 - Mistura de superfluidos atômicos e aprisionamento em vórtices SANTARELLI, M. A. C. ; NEVES, J. B.	80
IC40 - Incorporação do Gálio em vidros bioativos: novas relações estruturais/funções descobertas por técnicas de RMN de estado sólido GOMES, Y. H. F. ; ECKERT, H.	81

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Development of low energy and high repetition rate femtosecond laser PINTO, V. P. ; NOGUEIRA, G. T. ; YASUOKA, F. M. M. ; CASTRO NETO, J. C.	83
PG2 - Caracterizando a complexidade de redes neuronais teóricas em termos de distribuições de motifs DOMINGUES, G. S. ; COSTA, L. F.	84
PG3 - The time-dependent real-space numerical renormalization group formulation OLIVEIRA, L. N. ; D'AMICO, I. ; PICOLI, F. D.	85

PG4 - Instabilidade de Rayleigh-Taylor quântica em condensados de Bose-Einstein bidimensionais CUNHA, P. H. C. ; CASTILHO, P. C. M.	86
PG5 - Terapia fotodinâmica em microambientes fabricados via polimerização por absorção de dois fótons SAPIO, C. A. ; MENDONÇA, C. R.	87
PG6 - Mecanismo de aceleração de Fermi sob a hipótese de quebra de invariância de Lorentz DUARTE, M. ; SOUZA, V.	89
PG7 - Searching for heavy dark matter with gamma-rays SIQUEIRA, C. ; JUSTINO, L. R. ; VIANA, A.	91
PG8 - Dissipative adaptation of driven spin-boson model PINTO, D. S. ; AFONSO, R. ; VALENTE, D. ; GOETTEMES, E. I.	92
PG9 - Mega Protein: Cryo-EM structural determination a 8 MDa molluscan hemocyanin with substantial biomedic impact ELLENA, M. N. ; FERNÁNDEZ, V. C. ; AMBROSIO, A. L. B. ; LEGUIA, C. G. ; MUÑOZ, S. M. .	93
PG10 - Construção de sistema de translação óptica de átomos frios com uso de sistema de lentes de zoom opticamente compensadas MARTINEZ, V. J. ; HENN, E. A. L.	94
PG11 - Aprimoramento de medidas de campos microondas utilizando átomos de Rydberg em células quentes KONDO, J. D. M. ; MAGALHÃES, D. V. ; BORGES, B. V. ; PEPINO, V. M. ; MARCASSA, L. G. ; GOMES, N. D.	96
PG12 - A quantum model for seizures ARAUJO, H. S. ; MOUSSA, M. H. Y.	97
PG13 - A Computational Approach for Image-Based Monitoring and Morphological Characterization of Skin Lesions PALAMONI, O. ; MORIYAMA, L. T.	99
PG14 - Melhoramento das propriedades físico-químicas do anti-hipertensivo Hidroclorotiazida FIRMINO, P. P. ; ELLENA, J. ; SILVA, C. C. P. ; SANTIAGO, P. H. O.	101
PG15 - Excitation of Bose-Einstein condensates with temporal resolution in separate zones SANTARELLI, M. C. ; BAGNATO, V. S. ; MADEIRA, L. ; MACHADO, L. A.	103

PG16 - Átomos de Rydberg térmicos interagindo com campos de Micro-ondas ALVES JUNIOR, E. L. ; MARCASSA, L. G.	105
PG17 - Antiplasmodial profiling of peptide-like molecules as lead candidates for malaria GUIDO, R. V. C. ; MARTINS, F. C. P. ; MENDES, G. R. ; MOURA, I. M. R. ; MONTANARI, C. A. ; BONATTO, V. ; AGUIAR, A. C.	106
PG18 - Antiplasmodial activity assessment of the natural compound batzelladine L and synthetic derivatives as lead candidates for malaria BERLINCK, R. G. S. ; BORGES, N. M. M. ; GUIDO, R. V. C. ; MENDES, G. R. ; NORONHA, A. R. ; JURBERG, I. D. ; PINHEIRO, R. C. ; MOURA, I. M. R. ; SOUZA, R. M. S. ; BARBOSA, C. S. ; GOULART, T. A. C.	108
PG19 - In vivo anti tumoral and antiangiogenic activity of biomimetic nanoparticles using the chicken chorioallantoic membrane (CAM) assay FERREIRA, N. N. ; VERA, C. L. R. ; QUITIBA, J. V. B. ; RODERO, C. F. ; BALTAZAR, M. F. M. ; COSTA, M. S. F. ; MORENO, N. S. ; ZUCOLOTTO, V.	110
PG20 - Resposta fotodinâmica antimicrobiana em <i>Rhizopus oryzae</i> MARQUES, M. J. A. M. ; SOUSA, F. A. D. ; GUIMARÃES, F. E. G. ; KURACHI, C.	111
PG21 - Confinamento de cor e geometria em teorias de Gauge na rede MENDES, T. C. R. ; TONHON, R. C. S.	112
PG22 - First-order hyperpolarizability dispersion on chalcone-based molecules SCIUTI, L. F. ; SANTOS, C. H. D. ; PELOSI, A. ; MENDONÇA, C. R. ; BONI, L.	113
PG23 - Noninvasive tumor diagnostics using proteolytic activity nanosensors ZUCOLOTTO, V. ; SILVA, E. C.	114
PG24 - Effect of dimethylamine group on the nonlinear optical properties and fluorescence enhancement of acetamide-chalcone derivatives DE BONI, L. ; MENDONÇA, C. R. ; GONÇALVES, P. J. ; COCCA, L. H. Z. ; SILVA, D. L. ; PELOSI, A. G. ; ALVES JUNIOR, E. S. A. ; VALVERDE, J. V. P. ; OLIVEIRA, G. R.	115
PG25 - Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicos BARBOSA, M. G. ; VANZELLA, D. A. T.	116
PG26 - Implicações do teorema de Liouville para raios cósmicos ultra energéticos OLIVEIRA, C. ; SOUZA FILHO, L. V. ; MAIA, L. P.	118
PG27 - Novas técnicas experimentais para discriminação de diferentes efeitos ópticos não lineares refrativos MOYSÉS, R. M. ; MISOGUTI, L.	119

PG28 - Two-photon absorption and dynamics of excited states in Bromo-Chalcone derivatives	
MENDONCA, C. R. ; VALVERDE, J. V. ; MARUCCI, N. B.....	121
PG29 - Reposicionamento farmacêutico do fármaco antiviral Aciclovir: novos sais farmacêuticos	
SANTIAGO, P. H. O. ; SILVA, C. C. P. ; ELLENA, J. A. ; NUNES, P.	122
PG30 - On the nature of the black hole information problem	
BERNARDES, E. S. ; BERGAMASCHI, T. T.	123
PG31 - Reconhecimento de minérios de ferro por aprendizagem de máquina	
QUEIROZ, A. A. A. E. ; ANDRADE, M. B.	125
PG32 - Benchmarking variational quantum eigensolvers for detection of many-body Hamiltonian entangled ground state	
FERREIRA, P. C. A. ; DRINKO, A. ; CORRER, G. I. ; MEDINA, I. ; PINTO, D. O. S.	127
PG33 - Incorporation of niobium into photonic glasses: new structure/function relations uncovered by advanced magnetic resonance techniques	
HERNÁNDEZ, L. J. E. ; BRADTMÜELLER, H. ; ECKERT, H.....	128
PG34 - Dinâmica de fluídos computacional paciente-específica em artérias cerebrais saudáveis: uma análise utilizando arterial spin labeling	
SOLCIA, G. ; SUZUKI, Y. ; PAIVA, F. F.	129
PG35 - Análise da influência de diferentes grupos periféricos na absorção multifotônica em imidazopiridinas sulfonadas	
VALVERDE, J. V. ; MENDONCA, C. R. ; DE BONI, L. ; CAMPOS, G. O.	131
PG36 - Simulating the Gamma-Ray emission signature of the central molecular zone	
SOUSA, D. B. ; VIANA, A. E. M.	132
PG37 - Otimização de buscas indiretas de matéria escura com o Cherenkov Telescope Array CTA.	
SOUZA FILHO, L. V. ; MAMPRIM, J. G.	133
PG38 - Resposta ao tratamento do câncer de pele não-melanoma com Terapia Fotodinâmica em camundongos com alterações metabólicas	
MELO, N. J. ; INADA, N. M.	134
PG39 - Descoberta e desenvolvimento de candidatos antivirais contra a protease NS2B-NS3pro de Zika vírus	
GODOY, A. S. ; NOSKE, G. D. ; DOLCI, I. ; OLIVA, G. ; FERNANDES, R. S. ; CIPRIANO, L.	135

PG40 - Structural biology of yeast septin complexes

SALADINO, G. C. R. ; SILVA, R. M. ; CABREJOS, D. A. L. ; PEREIRA, H. D. ; GARRATT, R. C. ; ARAÚJO, A. P. U..... 137

PG41 - Desenvolvimento de um nanossensor fluorescente baseado em nanopartículas de hidroxiapatita para o diagnóstico da tuberculose

MACHADO, T. R. ; ZUCOLOTTI, V. ; NASCIMENTO, I. S. ; TAKEUTI, N. N. K..... 139

PG42 - Aplicação do índice de coincidência na descoberta de vias metabólicas co-expressas

SANTOS, J. P. C. ; BRUNO, O. M. 141

PG43 - Expressividade e capacidade de emaranhamento em circuitos de estrutura causal indefinida

FERREIRA, P. C. A. ; PINTO, D. O. S. ; DRINKO, A. ; CORRER, G. I. ; MEDINA, I. 142

PG44 - Seleção de moléculas orgânicas para estudos de óptica não-linear através da ferramenta computacional MolShaCS

INACIO, A. C. C. ; MENDONÇA, C. R..... 143

PG45 - Indirect detection of Dark Matter in dwarf galaxies with the Southern Wide-field Gamma-ray Observatory

ANDRADE, M. J. D. ; VIANA, A. E. M..... 144

PG46 - Quantification of Protoporphyrin IX concentration in murine pigmented melanoma by ex vivo, in situ and in vitro measurements

PRATAVIEIRA, S. ; AYALA, E. T. P. 145

PG47 - Development of an ultrafast pump and probe platform and its application in the characterization of photoisomerizing push-pull azobenzenes

DE BONI, L. ; GARCIA, R. Q. 147

PG48 - Unveiling a giant molecular second harmonic generation in supramolecular compounds by a femtosecond tunable HRS technique

VIVAS, M. G. ; MENDONÇA, C. R. ; SANTOS, C. H. D. ; DE BONI, L. 149

PG49 - Geometria e performance de circuitos quânticos de dois qubits.

HABERMANN, G. ; SOARES-PINTO, D..... 150

PG50 - Desvendando a Interação entre as Septinas Humanas e a Toxina Botulínica

ARAUJO, A. ; CAVINI, I. A. ; MAMANI, E. C. 151

PG51 - Desenvolvimento de imunossensor impedimétrico eletroquímico para diagnóstico da tuberculose

RIBEIRO, L. V. 152

PG52 - Signatures of ultra-high energy cosmic ray sources in large-scale anisotropy measurements	
LANG, R. G. ; DOURADO, L. A. ; SOUZA, V.....	154
PG53 - CoupledDipoles.jl: A Julia package for Cold Atoms	
MOREIRA, N. A. ; BACHELARD, R.....	156
PG54 - Avaliação da resistência à inativação fotodinâmica com curcumina em larvas de <i>Aedes aegypti</i>	
GARBUIO, M. ; INADA, N. M. ; SOUZA, M. S. ; BAGNATO, V. S. ; LIMA, A. R. ; SAMMARRO, K. J.	158
PG55 - Nanossistemas biomiméticos contendo Paclitaxel para tratamento do neuroblastoma	
ZUCOLOTTO, V. ; BOTASSIO, Y. G. ; CARDOSO, V. M. O.	160
PG56 - Tomografia de Coerência Ótica (OCT): scanner portátil de alta sensibilidade para imageamento da impressão digital de adultos e bebês	
YASUOKA, F. M. M. ; BUOZZI, M. T. ; CASTRO NETO, J. C.....	162
PG57 - Análise das propriedades fotoquímicas e de ação antimicrobiana do azul de metileno em solventes utilizados para a preservação de órgãos	
VOLLET FILHO, J. D. ; CROCE, J. N. ; KURACHI, C.	164
PG58 - Saturation-induced bistability in strontium atoms interacting with an optical cavity	
RIVERO JEREZ, Y. D. ; FRANÇA, G. H. ; PESSOA JUNIOR, C. ; COURTEILLE, P. W.	166
PG59 - Planejamento de novos agentes quimioterápicos para o tratamento da doença de Chagas	
ANDRICOPULO, A. D. ; OLIVEIRA, A. S. ; DÖRING, T. H. ; FERREIRA, L. L. G.	167
PG60 - Propagadores de quark no calibre de Landau	
MENDES, T. C. R. ; LEAL JUNIOR, J. M.	169
PG61 - Produção de um feixe supersônico de Rb_2 no estado $X^1\Sigma_g^+(v_X = 0)$ por meio de bombeamento óptico	
FERNÁNDEZ, D. R. ; TORRES, M. L. ; CARDOSO, M. R. ; MARCASSA, L. G.	170
PG62 - Quantum complexity in the presence of quantum error correction and prevention	
SILVA, A. H. ; MORAZOTTI, N. A. C. ; NAPOLITANO, R. J.	171
PG63 - Integração do framework PyMR com o ambiente integrado de desenvolvimento Spyder e sua adaptação à projetos de Ressonância Magnética	
CORREIA, D. S. ; TANNUS, A.....	173

PG64 - Magnetic Resonance Imaging for short relaxation times applied to seed evaluation ALVES, R. ; GOMES JUNIOR F. G. ; TANNÚS, A. ; MARCOLAN, J. ; MARASSI, A.	175
PG65 - Descoberta de candidatos antivirais contra a protease nsP2pro de Chikungunya FERNANDES, R. S. ; OLIVA, G. ; CIPRIANO, L. ; DOLCI, I. ; GODOY, A. S.	177
PG66 - Desenvolvimento de sistema led de iluminação para terapia fotodinâmica mediada por rosa bengala para inibição de infecção bacteriana na córnea do olho humano. OLIVEIRA, A. O. ; CASTRO NETO, J. C. ; LAISSENER, B. S.	179
PG67 - Estudo do sinergismo de arabinofuranosidase de <i>Bifidobacterium longum</i>.com xilanases para produção de pré-bióticos a partir de bagaço de cana-de-açúcar CAPETTI, C. C. M. ; POLIKARPOV, I. ; PELLEGRINI, V. O. A.	180
PG68 - Coeficiente de adesão em átomos colidindo em uma superfície metálica SILVA, G. D. ; OLIVEIRA, L. N.	182
PG69 - The Hidden Symmetries of Yang-Mills theory on Loop Spaces MALAVAZZI, H. ; MARTINS, G. L. ; FERREIRA, L. A.	184
PG70 - Aplicação de RNN/ELM para extração de características de sequências de PNRG BRUNO, O. M. ; RODRIGUES, N. E.	185
PG71 - Desenvolvimento de sistema aplicado à Agricultura de Precisão para classificação de plantas de soja e plantas daninhas utilizando Visão Computacional e imagens multiespectrais CASTRO NETO, J. C. ; ODA, Y. S.	187
PG72 - Geometria clássica em Grassmannianas FERREIRA, C. H. G. ; PINTO, D. O. S. ; MAGNO, G. F.	189
PG73 - Reservoir computing: using conjugated polymers for constructing physical reservoirs FARIA, G. ; TORRES, B. B. M. ; SOUZA, R. F. S.	190
PG74 - Uso do vírus psudotipado SARS-CoV-2 para estudos da ação de derivados de Bothropstoxin-I como inibidor de entrada viral GUIMARÃES, F. E. G. ; CAMARGO, G. M.	191
PG75 - Cooperação na evolução pré-biótica: seleção de grupos FONTANARI, J. F. ; ARAUJO, J. M. R.	193

PG76 - Princípio variacional, segunda lei e simulação de temperatura em condensados de Bose-Einstein espinoriais MUNIZ, S. R. ; DONATO, M. H. F.	194
PG77 - Descoberta de derivados nitrofurânicos como inibidores de Plasmodium falciparum MALUF, S. E. C. ; SOUZA, G. E. ; GUIDO, R. V. C. ; BARONI, A. C. M. ; MOURA, I. M. R. ; RIGO, C. F. S. ; MENDES, G. R.	195
PG78 - Development and characterization of nanoporous materials using cryoporometry and nuclear magnetic resonance techniques TREBBI, B. ; AZEVÊDO, E. R. ; GARCIA, R. H. ; FILGUEIRAS, J. G.	197
PG79 - Second-order density correlations for characterizing non-equilibrium quantum systems MADEIRA, L. ; ARMIJOS, M. A. M. ; TELLES, G. D. ; MACHADO, L. A. ; FRITSCH, A. ; BAGNATO, V. S. ; OROZCO, A. D. G.	199
PG80 - Estudo do mecanismo de inibidores da entrada viral e ensaio de neutralização por pseudovírus SARS-CoV-2 em laboratório BSL2 PINTO JUNIOR, F. F. ; MIRANDA, M. ; SADRAEIAN, M. ; GUIMARÃES, F. E. G.	200
PG81 - Optical strategies for the treatment of cutaneous melanoma JASINEVICIUS, G. O. ; BUZZÁ, H. H. ; MORIYAMA, L. T. ; KURACHI, C. ; CHEN, J. ; ZHENG, G. ; MARTINELLI, L. P. ; TOVAR, J. S. D.	202
PG82 - Purificação quântica para incluir ruído ambiental na investigação do conceito de complexidade quântica MONTEIRO, G. N. A. ; NAPOLITANO, R. J.	204
PG83 - Estudo de nanotermodinâmica com moléculas e fótons ALVARENGA, L. N. C. ; MUNIZ, S. R.	205
PG84 - Deep Variational Anomaly Generation: An Approach to Testing Molecular Representation Robustness NOGUEIRA, V. ; SHARMA, R. ; KEISER, M. ; GUIDO, R. V. C.	206
PG85 - Biologia estrutural do carreador mitocondrial de piruvato humano (MPC), proteína-chave no metabolismo de glicose e na adaptação metabólica tumoral DELPHITO, L. ; AMBROSIO, A. L. B.	208
PG86 - Influência da temperatura na internalização da curcumina em Escherichia coli LIMA, T. H. N. ; BAGNATO, V. S. ; BLANCO, K. C.	210
PG87 - QCD em altas ordens no decaimento do Higgs em dois glúons NOGUEIRA, G. A. ; BOITO, D. R.	212

PG88 - Sobre a detectabilidade da Violação da invariância de Lorentz em chuviscos atmosféricos extensos SOUZA FILHO, L. V. ; MUNDO, T. L.	213
PG89 - A fotoxidação em bactérias persistentes BLANCO, K. C. ; CORRÊA, B. C.	214
PG90 - Mecanismos básicos da propagação do ultrassom com tecidos biológicos para aplicação na Terapia Sonodinâmica (TSD) APARECIDA, C. A. ; PRATAVIEIRA, S.	215
PG91 - Ação fungicida de tubos endotraqueais funcionalizados com curcumina BLANCO, K. C. ; BAGNATO, V. S. ; SANTOS, G. G.	217
PG92 - Desenvolvimento e validação de um método analítico para quantificação da cisplatina a partir de nanocarreadores biomiméticos CARDOSO, V. M. O. ; ZUCOLOTTI, V. ; BISTAFFA, M. J.	219
PG93 - Nanocarreadores multifuncionais para aplicação em câncer de pulmão BERNARDI, J. C. ; GALVANI, P. B. ; ZUCOLOTTI, V.	221
PG94 - Radiative model reconstruction of the Galactic Center central gamma-ray source VIANA, A. E. M. ; MOMESSO, D. C.	223
PG95 - Funções de Green e confinamento de cor CUCCHIERI, A. ; GARCIA, G. H. M.	224
PG96 - Quantum Complexity and efficient synthesis of quantum evolution in the presence of noise SILVA, A. H. ; MORAZOTTI, N. A. ; NAPOLITANO, R.	225
PG97 - Identificação e caracterização do <i>black carbon</i> dissolvido: sua associação com matéria orgânica dissolvida e sua toxicidade em zooplanktons PRATAVIEIRA, S. ; VICENTE, M. L. F. ; VERAS, M. M. ; TOVAR, J. S. D. ; GUIMARÃES, F. E. G. ; SALDIVA, P. H. N. ; MOUNIER, S. ; HAJJOUL, H.	226
PG98 - Construção de simulacros quânticos MOUSSA, M. H. Y. ; SILVA, L. F. A.	228
PG99 - Efeitos do strain em nanofios politípicos SIQUEIRA, A. H. ; SIPAHI, G. M.	229
PG100 - Superradiância e superabsorção em amostras atômicas densas MOUSSA, M. H. Y. ; ARAÚJO, Í. M.	230

PG101 - Sistemas estáticos, estacionários e dependentes do tempo no Anti-de-Sitter e sua interpretação holográfica HARTMANN, B. ; RAMPONI, T. C.	232
PG102 - Resposta vascular da combinação de fotobiomodulação e radioterapia em carcinoma epidermóide SOUZA, G. ; PATIÑO, C. P. B. ; FARIA, C. M. G. ; COSTA, C. S. ; BAGNATO, V. S.	233
PG103 - Evaluating photodynamic therapy with Protoporphyrin IX in the context of mitochondrial bioenergetics MEZZACAPPO, N. F. ; BAGNATO, V. S. ; INADA, N. M.	235
PG104 - Sensoriamento quântico inercial com átomos de estrôncio PESSOA JUNIOR, C. A. ; FRANÇA, G. H. ; JEREZ, Y. D. R. ; TEIXEIRA, R. C. ; COURTEILLE, P. W.	236
PG105 - Structural and biochemical characterization of SARS-CoV-2 main protease maturation process GODOY, A. S. ; NOSKE, G. D. ; OLIVA, G. ; FERNANDES, R. S.	237
PG106 - Estudo de Gases Quânticos através da observação de Sólitos HENN, E. A. L. ; ATTIE, J. A. G.	239
PG107 - Monte Carlo simulation proposal to narrow-line magneto-optical traps HENN, E. A. L. ; SANTOS, B. N.	240
PG108 - Dimensional crossover in Fermi gases with attractive interactions MACÊDO-LIMA, M. ; MADEIRA, L.	241
PG109 - Investigação da morte de células B16F10 in vitro com associação de radioterapia e terapia fotodinâmica LOPES, R. G. ; MEDEIROS, A. I. ; BAGNATO, V. S. ; RAIMUNDO, B. V. B. ; INADA, N. M.	243
PG110 - Análise multiparamétrica do problema de fases em cristalografia de proteínas por aprendizado de máquina - Caso de estudo: lisozima da clara do ovo de galinha JUCOVSKI, A. G. ; AMBROSIO, A. L. B.	245
PG111 - Termodinâmica de condensados de Bose-Einstein: equação de estado empírica e alguns ciclos associados BAGNATO, V. S. ; MARTINS, E. B.	247
PG112 - Pathway toward catastrophe: cellular dynamics on hit-to-lead compound optimisation for current drug discovery pipelines SOUZA, M. S. ; MEIRING, J. C. M. ; IYER, S. ; SILVA, T. S. ; MASS, E. B. ; COELHO, F. ; RUSSOWSKY, D. ; GRIGORIEV, I. ; AKHMANOVA, A. ; ANDRICOPULO, A. D.	248

PG113 - Instrumentação eletrofisiológica dedicada não-invasiva aplicada para a caracterização da sensibilidade visual de peixes elétricos de campo fraco PINTO, R. D. ; BELLINI, B. S.	250
PG114 - Spontaneous scalarization of self-gravitating magnetic fields. BRIHAYE, Y. ; HARTMANN, B. ; CAPOBIANCO, R. A.	252
PG115 - Análise teórica das condições de nucleação sobre as bicamadas fosfolipídicas das membranas celulares para aplicação da Terapia Sonodinâmica CUMPALLI, A. A. ; PRATAVIEIRA, S. ; BAGNATO, V. S. ; ANTUNES, C. A.	253
PG116 - Análise das propriedades físico-químicas do surfactante pulmonar na terapia fotodinâmica antimicrobiana: desafios e perspectivas no combate à infecção por Streptococcus Pneumoniae TOVAR, J. S. D. ; LIMA, I. A. ; BAGNATO, V. S. ; FIUZA, L. G. ; KURACHI, C. ; INADA, N. M.	255
PG117 - Aprimoramento da terapia fotodinâmica antimicrobiana inibida pelo surfactante pulmonar através da combinação com ultrassom de baixa frequência KURACHI, C. ; JESUS, L. G. F. ; INADA, N. M. ; BAGNATO, V. S. ; LIMA, I. A.	257
PG118 - Quantum tomography: unveiling quantum state and processes DOMINGUES, A. V. ; MUNIZ, S. R.	259
PG119 - Estudos estruturais e bioquímicos de 10 enzimas com possível atividade de PET hidrolase oriundas de metagenoma antártico GARRATT, R. C. ; PEREIRA, H. D. ; SCULACCIO, S. A. ; SANTILLAN, J. A. V. ; CABREJOS, D. A. L. ; FURTADO, A. A.	260
PG120 - Identification of new metabolic enzymes with filament capacity defined by transmission electron microscopy GARRATT, R. C. ; DIAS, S. M. G. ; AMBROSIO, A. L. B. ; SANTILLAN, J. A. V. ; MACHADO, R. A. M.	261
PG121 - Study of the Galactic Center region and searches for dark matter with the Fermi Gamma-ray Space Telescope BRAGA, A. V. A. M. ; VIANA, A. E. M.	262
PG122 - Plasmonic biosensors based on AUNI/glass substrates using optical microscopy and machine learning image classification as detection methods OITICICA, P. R. A. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; SCABINI, L. F. S. ; BRUNO, O. M. ; RIBAS, L. C.	263
PG123 - Refinando o momento magnético anômalo do múon no modelo padrão com decaimentos hadrônicos do tau e QCD na rede MANSUR, L. M. ; BOITO, D.	264

PG124 - Searching dark matter in galaxy clusters with high energy gamma-rays VIANA, A. ; RAMOS, M. E. M.....	265
PG125 - Descoberta de inibidores do complexo RNA polimerase dependente de RNA (RdRp) de SARS-CoV-2 como candidatos a compostos líderes para covid-19. OLIVA, G. ; OLIVEIRA, J. R. T. S. ; GUIDO, R. V. C. ; GODOY, M. O.....	266
PG126 - Efeitos opto-térmicos em microrressonadores e microcavidades WGM MENDONÇA, C. R. ; MARQUES, V. A. S.	268
PG127 - Sensitivity to kev-MeV dark matter from cosmic-ray scattering VIANA, A. E. M. ; REIS, I. ; MOULIN, E.....	270
PG128 - Análise da produção de PpIX a partir da aplicação de ALA oral em lesões de língua de rato Wistar BUZZÁ, H. H. ; STRINGASCI, M. D. ; INADA, N. M. ; ARRUDA, S. S. ; BAGNATO, V. S.	271
PG129 - A dependência temporal da descoerência de um qubit por ruído de fase: cálculos analíticos das soluções exata e da equação mestra NAPOLITANO, R. J. ; MOTTA, O.....	273
PG130 - Caracterização óptica e bioquímica da melanina – estudo comparando a melanina sintética e biológica GUIMARÃES, F. E. G. ; SOUZA, G. ; KURACHI, C.....	274
PG131 - Development of a nanopolarizer based on plasmonic structures in Er³⁺-doped tellurite glasses CALDERÓN, G. L. ; RIVERA, V. A. G. ; MESSADDEQ, Y. ; MAREGA JUNIOR, E.	276
PG132 - Bounding the effective Zeno dynamics on amplitude damping beyond the Zeno limit ZAMBON, G. C. ; PINTO, D. O. S.	277
PG133 - Transistores orgânicos por efeito de campo com camadas dielétricas orgânica e inorgânica CAPUZZO, L. B. ; SOUSA, M. S. ; MIRANDA, P. B.	278
PG134 - Um framework para desenvolvimento de sistemas integrados móveis e web para aplicações científicas em inteligência artificial BRUNO, O. M. ; RIBAS, L. C. ; FURTADO, E. F.	280
PG135 - Estudo do mecanismo de secagem de diferentes formulações de argamassas utilizadas na construção civil por RMN BONAGAMBA, T. J. ; MARASSI, A. G. ; PEREIRA, L. A.	282

PG136 - Estudos estruturais, biofísicos e bioquímicos de CAZymes com potencial na degradação de exopolissacarídeos de biofilmes microbianos FREITAS, A. ; ARAÚJO, E. A. ; POLIKARPOV, I.	283
PG137 - Chiral Majorana edge states in topological superconductors MENEZES, J. C. E. ; PENTEADO, P. H. ; FRANCO-DIAZ, E. R.	284
PG138 - Células solares orgânicas: estudo de estabilidade e degradação em uso contínuo FLOREZ, Y. A. ; FARIA, R. M. ; FARIA, G. C.	285
PG139 - Dynamic of vortex in a dipolar BEC bubble BERETA, S. J. ; SANTARELLI, M. A. C.	287
PG140 - Investigating optical non-linearities and triplet quantum yield in porphyrins-chalcone structures FAUSTINO, M. A. ; VALVERDE, J. V. ; SILVA, J. A. ; DE BONI, L. ; GARCIA, R. Q.	288
PG141 - Florestas bipartidas semi-supervisionadas para predição de interações CERRI, R. ; ILÍDIO, P. ; ALVES, A. H. R. ; THIEMANN, O. H.	289
PG142 - Descontaminação de rim suíno para transplante com radiação ultravioleta-c e técnicas acopladas GOENAGA, L. ; FILHO, J. D. V. ; INADA, N. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.	290
PG143 - Clonagem e expressão da quinase plasmodial CLK3 OLIVEIRA, G. ; GODOY, A. S. ; GUIDO, R. V. C.	292
PG144 - Seleção de bactérias isoladas de um reservatório de petróleo brasileiro para a produção de biossurfactante: análises de inversão de molhabilidade em meio poroso e caracterização do biossurfactante semipurificado FERREIRA, J. F. ; BOSSOLAN, N. R. S.	294
PG145 - High on/off ratio on PEDOT:PSS-based OECT TORRES, B. B. M. ; LUGINIESKI, M. ; FARIA, G. C.	296
PG146 - Ativação da monooxigenase lítica de polissacarídeo de <i>Myceliophthora thermophila</i> utilizando fotossensibilizadores da terapia fotodinâmica SEPULCHRO, A. G. V. ; POLIKARPOV, I. ; DIAS, L. D. ; VACILOTTO, M. M. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; INADA, N. M.	297
PG147 - Aprisionamento óptico de sistemas biológicos para estudo da ação de agentes antimicrobianos em células individuais SILVA, L. R. G. ; MUNIZ, S.	299

PG148 - Estudo sobre os padrões espaço-temporais de autômatos celulares em redes complexas JOAQUIM, D. T. ; BRUNO, O. M.	300
PG149 - Método de fitting de estruturas de bandas a partir de estratégias envolvendo propriedades de simetria para obtenção de parâmetros de Luttinger, Kane e g-factor WANDERLEY, A. B. ; SIPAHI, G. M. ; OLIVEIRA, C. E.	302
PG150 - Estudo de propriedades de qubits em sistemas de baixa dimensionalidade PAULI, I. G. ; SIPAHI, G. M.	304
PG151 - Non-Markovian effects at the quantum speed limits PINTO, D. O. S. ; SILVA, A. J. B.	306
PG152 - Characterization of a Dimerized Indocyanine Green Nanoemulsion as a Photothermal Agent JASINEVICIUS, G. O. ; KWON, N. ; MARTINELLI, L. P. ; KASSAB, G. ; BAGNATO, V. S. ; CHEN, J. ; ZHENG, G. ; BUZZÁ, H. H. ; KURACHI, C.	307
PG153 - Nanopartículas de membrana e exossomos derivados de células tumorais para entrega de agentes imunomodulatórios ZUCOLOTTI, V. ; QUITIBA, J. V. B.	309
PG154 - Structural characterization of Magnaporthe oryzae septins causing rice blast fungus GARRATT, R. C. ; ABBAS, Z.	311
PG155 - Caracterização funcional do complexo de replicação (DNA polimerase) do vírus Monkeypox, visando a busca por candidatos a fármacos antivirais OLIVEIRA, J. R. T. S. ; OLIVA, G. ; SILVA, B. R.	313
PG156 - Estudos de caracterização de microagulhas dissolvíveis com 10% de ácido aminolevulínico e sua aplicação em tumor animal BEJAR, D. S. L. ; BAGNATO, V. S. ; REQUENA, M. B.	315
PG157 - Análise multi-resolução inteligente: combinando a Transformada Wavelet com estratégias de <i>deep learning</i> para redução de ruídos em imagens de ressonância magnética PAIVA, F. F. ; QUEIROZ, G. E. T. ; GUIDO, R. C.	317
PG158 - Time evolution of a Bose-Einstein condensate of Na atoms under fast potential variation CHACCA, C. W. T. ; CASTILHO, P. C. M. ; FARIAS, K. M. ; BAGNATO, V. S. ; SALCEDO, E. G. I. ; GASPAR, P. M.	319

PG159 - Credulidade completa e erosão da confiança em um modelo de informação enganosa FONTANARI, J. F. ; TÓRTURA, H. A.	320
PG160 - Controle de um Sistema para Imageamento Hiperespectral de Lesões de Pele GARCIA, M. ; PRATAVIEIRA, S. ; VIEIRA, B. F.	322
PG161 - Septinas de <i>Magnaporthe oryzae</i>: uma abordagem estrutural CAVINI, I. A. ; ARAUJO, A. P. U. ; FERNÁNDEZ, L. A. V. ; CIOL, H. ; PINTO, A. P. A. ; ABBAS, Z. ; MENDONÇA, D. C. ; GARRATT, R. C.	324
PG162 - Índice de melanina, índice de eritema e luminosidade da pele humana: dados experimentais e simulações de Monte Carlo LIMA, V. P. G. ; MORIYAMA, L. T.	326
PG163 - Produção e manipulação de moléculas frias FERNÁNDEZ, D. R. ; MARCASSA, L. G. ; TORRES, M. L. ; CARDOSO, M.	328
PG164 - Molecular dynamics simulations of drug interactions with cell membrane models OLIVEIRA JUNIOR., O. N. ; ZAPATA, J. C. B. ; MOURA, A. F.	329
PG165 - Separation of iron and proton induced air showers using convolutional neural networks VECCHI, M. ; SOUZA, V. ; GILER, A. G. D.	330
PG166 - Caracterização e controle do perfil de dano anatômico e histológico da terapia sonodinâmica em modelo animal PRATAVIEIRA, S. ; BAGNATO, V. S. ; CARVALHO, I. S. ; ALVES, F.	331
PG167 - Centros nitrogênio-vacância como plataforma para estudo de flutuações quânticas MUNIZ, S. R. ; ANDRADE, L. N. S.	332
PG168 - Expressão recombinante de histonas de <i>Trypanosoma cruzi</i>. para construção de nucleossomos ISSA, M. ; THIEMANN, O.	333
PG169 - Study of structural and dynamic properties in Li phosphate glasses by solid state NMR and impedance spectroscopy SCHNEIDER, J. F. ; FERREIRA, M. J. ; MORGUETTO, G. F.	335
PG170 - Caracterização de enzimas ThiL de bactérias gram-negativas NASCIMENTO, A. ; FARRO, E. G. S.	337

PG171 - Investigation of the mode of action underlying brussanol's antiplasmodial activity	
BARBOSA, C. S. ; MALUF, S. E. C. ; AHMAD, A. ; BURTOLOSO, A. ; DUTRA, M. L. G. ; LEHANE, A. ; AGUIAR, A. C. C. ; GUIDO, R. V. C.	339
PG172 - Estudos estruturais de circovirus suino: que regiões alvo são promissoras?	
GARRATT, R. C. ; ROCHA, T. S. ; THIEMANN, O. H.	341
PG173 - Optimal processes measurements in a dynamically modulated optical tweezers system	
MARTINS, T. T. ; KAMIZAKI, L. P. ; MUNIZ, S. R.	343
PG174 - Caracterização de minerais brasileiros por múltiplas técnicas estruturais e espectroscópicas	
ANDRADE, M. B. ; ATENCIO, D. ; LOPES, G. A. C.	344
PG175 - Evolução dos observáveis de um fluido quântico turbulento	
MARINO, Â. V. M. ; MADEIRA, L. ; CIDRIM, A. ; SANTOS, F. E. A. ; BAGNATO, V. S.	346
PG176 - Avaliação e sincronia de osciladores utilizando diferentes meios e métodos	
DAMACENO, L. P. ; MAGALHÃES, D. V.	347
PG177 - Avanços na confiança e precisão dos padrões de frequência com átomos frios: implicações para metrologia	
MAGALHÃES, D. V. ; MASCARIN, R. P.	349
PG178 - Identificação de espécies de madeira baseado em fusão de características em três planos anatômicos	
RIBAS, L. C. ; SCABINI, L. ; ZIELINSKI, K. ; BRUNO, O. M.	350

IC1

Dark matter spike and gamma-ray boost around the black hole at the Galactic Center

VIANA, Aion¹; SILVA, Murillo Gregorio Grefener da¹

murilloggsilva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nowadays, it is widely acknowledged that the Universe's matter density is predominantly composed of an enigmatic constituent known as Dark Matter (DM). This DM is thought to be composed of a novel elementary particle that is neutral, stable, and non-baryonic in nature. In dense regions of the Universe, DM may undergo self-annihilation or decay, generating a potent gamma-ray signature. (1) Dwarf galaxies, galaxy clusters and the Galactic Center are compelling candidates to harbour such sizable high energy gamma-ray signals. The adiabatic growth of a black hole in the center of some of these objects can lead to a significant enhancement of the dark matter density close to the hole and, as a consequence, a strong enhancement of the expected gamma-ray flux. (2) For instance, the center of the Milky Way harbours a supermassive black hole (SMBH), Sagittarius (Sgr) A*, and a bright gamma-ray source has been observed by both the Fermi-LAT and H.E.S.S. telescopes, in a position coincident with the SMBH. This project aims to study the creation of adiabatic spikes in the center of DM halos, and to test whether the self-annihilation "boost" effect around Sgr A* can explain the Galactic Center central gamma-ray source. The main objective of the proposed activity is to introduce the student to the context of research in Astrophysics and Astroparticle Physics, by means of the study of one of the leading topics in this field: the indirect search for dark matter.

Palavras-chave: Matéria escura. Centro galáctico. Buraco negro.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 DAYLAN, T. *et al.* The characterization of the gamma-ray signal from the central Milky Way: a case for annihilating dark matter. **Physics of the Dark Universe**, v. 12, p. 1-23, June 2016. DOI: 10.1016/j.dark.2015.12.005.

2 BALAJI, S.; SACHDEVA, D.; SALA, F.; SILK, J. **Dark matter spikes around Sgr A* in γ -rays**. 2023. Available at: <https://arxiv.org/pdf/2303.12107.pdf>. Accessible at: 30 Sept. 2023. DOI: 10.48550/arXiv.2303.12107.

IC2

Preparação e caracterização de vidros fosfatos de íons alcalinos e alcalinos terrosos

FERREIRA, Matheus José¹; SCHNEIDER, José Fábio¹; MORGUETTO, Gabriel Felipe¹

mat.mat.jose@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A substituição de baterias de eletrólitos líquidos para baterias de estado sólido permitiu diversos estudos para aplicações industriais. Materiais vítreos são candidatos a substituir os eletrólitos líquidos em baterias de Lítio. (1) Para entender esses materiais, duas séries de vidros mistos de Li com cátions mono (Na^{+1}) e divalente (Ca^{+2}), Li-Na e Li-Ca, respectivamente, foram consideradas: $(1-x-y)Li_2O - xR - yP_2O_5$, com $R = CaO$ ou $R = Na_2O$, com $0,4 \leq y \leq 0,5$ (fração molar), $0 \leq x \leq 0,6$ e razões de substituição $0 \leq [Li]/[Li + Ca] \leq 1$ e $0 \leq [Li]/[Li + Na] \leq 1$. Volumes molares e temperaturas de transição vítrea foram analisados em função da concentração do cátion alcalinoterroso e da concentração de P_2O_5 . Técnicas de ressonância magnética nuclear em núcleos de ^{31}P e 7Li foram aplicadas para analisar a estrutura de curto e médio alcance em torno dos grupos fosfatos. (2-3) Como função de Ca, variações no desvio químico isotrópico médio, crescimento da T_g e da densidade, foram explicadas pelo maior potencial iônico do Ca em relação ao Li. Ainda, verificou-se que concentrações maiores de P_2O_5 produzem matrizes vítreas menos compactas (redução na fração de empacotamento) e mais rígidas (elevação das T_g). Por fim, os experimentos e resultados no estudo da ordem de médio alcance das matrizes vítreas na série Li-Na mostraram as conectividades existentes para diferentes composições, onde o número de conexões $Q^2 - Q^2$ crescia a medida que a concentração de P_2O_5 aumentava. O resultado mostrou, também, que a adição de outro íon à cadeia, no caso o Li, fez com que a quantidade de dímeros se reduzisse drasticamente, sendo essa a primeira evidência experimental de diferente organização em médio alcance de vidros fosfatos mistos.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Vidros fosfatos. Transição vítrea.

Agência de fomento: FAPESP (2022/05132-1)

Referências:

- 1 SCHNEIDER, J.F.; ZINN, G.B. Non-random bonding of mono/divalent cations in mixed phosphate glasses. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 470, p. 38-46, Aug. 2017. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2017.04.045.
- 2 WAZER, J. **Phosphorus and its compounds**, New York: Interscience, 1964.
- 3 CADAR, S.; LESAGE, A. *et al.* NMR measurements of scalar-coupling distributions in disordered solids. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 2007, n. 9, p. 92-103, 2007.

IC3

Estudo da interação do coiled-coil de septinas Cdc3-Cdc12 com peptídeos de proteínas Gic

SILVEIRA, Pedro Masotti Moretti da¹; CAVINI, Ítalo Augusto¹; ARAÚJO, Ana Paula Ulian de¹

pmasotti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas citoesqueléticas capazes de se ligar a nucleotídeos de guanina e participam de funções celulares diversas como exocitose, fagocitose, citocinese, entre outras, com presença em todos os metazoários e fungos. (1) Estruturalmente as septinas se destacam pela organização em complexos heteroligoméricos lineares que se unem em filamentos e em estruturas de maior complexidade. Em leveduras, temos o octâmero composto por Cdc11-Cdc12-Cdc3-Cdc10-Cdc10-Cdc3-Cdc12-Cdc11, no qual as septinas Cdc3 e Cdc12 estão associadas por uma interface do tipo NC, de forma que seus domínios C-terminais formam uma região de *coiled-coil*, supostamente paralelo e heterodimérico. É fato que septinas interagem com outras proteínas, como as proteínas BORG's humanas, membros da família das efectoras da Cdc42, responsável por regular diversos processos do ciclo celular. Essas proteínas ligam-se ao *coiled-coil* da SEPT6-SEPT7, análogo ao da Cdc3-Cdc12, por um domínio chamado BD3. (2) As homólogas funcionais de BORG's em levedura são as chamadas Gic1 e Gic2. Desta forma, neste trabalho buscou-se estudar a interação entre o *coiled-coil* de Cdc3-Cdc12 com as Gic's, predita pela modelagem do complexo em *AlphaFold2*, verificando se ocorre de forma análoga ao que se observa em humanos. Para isso, a interação dos domínios C-terminais das septinas Cdc3-Cdc12 com a região BD3 das Gic's foi explorada por meio de espectroscopia por dicroísmo circular, utilizando uma análise comparativa da temperatura de *melting* dos complexos. (3) Os experimentos de desnaturação térmica foram conduzidos em diferentes ensaios, envolvendo também peptídeos Gic-BD3 mutados a fim de validar o modelo de interação.

Palavras-chave: Septinas. *Coiled-coil*. Espectroscopia de dicroísmo circular.

Agência de fomento: CNPq (135003/2022-9)

Referências:

- 1 CAVINI, I. A. *et al.* The structural biology of septins and their filaments: an update. **Frontiers in Cell and Developmental Biology**, v. 9, p. 765085-1-765085-52, Nov. 2021. DOI: 10.3389/fcell.2021.765085.
- 2 SHEFFIELD, P. J. *et al.* 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. DOI: 10.1074/jbc.M209701200.
- 3 SALA, F. A. *et al.* Heterotypic coiled-coil formation is essential for the correct assembly of the septin heterofilament. **Biophysical Journal**, v. 111, n. 12, p. 2608-2619, 2016. DOI:

10.1016/j.bpj.2016.10.032.

IC4

Ressonância magnética nuclear em estado sólido para o estudo de sílica organicamente modificada dopada com complexos organometálicos luminescentes.

OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de¹; OYAMA, Yuri Kazuhiro¹

yurikazuhirooyama@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste projeto de iniciação científica, propomos o estudo de materiais híbridos orgânico-inorgânicos obtidos pelo processo sol-gel. Os materiais são obtidos pela reação de silanos organicamente modificados, formando matrizes porosas ou não, que podem ser dopadas, durante ou após o processo de síntese, com complexos organometálicos. Esses materiais apresentam luminescência com base na emissão do centro metálico, sendo indicados para aplicações em óptica e fotônica. (1) A intensidade, tempo de vida e rendimento quântico do processo de luminescência estão relacionados com a sinergia entre os íons emissores e a matriz hospedeira. Portanto, o conhecimento sobre a estrutura do ormosil e como ela é afetada pela presença das espécies luminescentes é de fundamental importância. O objetivo geral da pesquisa é a caracterização estrutural da rede hospedeira e o impacto do processo de dopagem nesta estrutura, utilizando técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de estado sólido. (2) Este projeto se encaixa na área de tecnologias habilitadoras, setor de materiais avançados; uma das áreas definidas como prioritárias pelo MCTIC.

Palavras-chave: RMN. NMR. Solid state NMR.

Agência de fomento: CNPq (141984/2022-8)

Referências:

1 VILELA, R.R.C. *et al.* Structural and photophysical characterization of highly luminescent organosilicate xerogel doped with Ir(III) complex. **Journal of Sol-Gel Science and Technology**, v. 102, n. 1, p. 236-248, Apr. 2022.

2 OLIVEIRA JUNIOR, M. **Estudo de complexos fotocrômicos de xerogéis de ormosil através de ressonância magnética nuclear em estado sólido**. 2009. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

IC5

Desvio da transição de Condensado de Bose-Einstein na presença de uma segunda espécie

CASTILHO, Patrícia Christina Marques¹; GASPAR, Pedro Minarelli¹

pedrominarelligaspar@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Gases quânticos como os condensados de Bose-Einstein são produzidos experimentalmente a partir de sistemas de gases ultrafrios fracamente interagentes resfriados a temperaturas de centenas de nanokelvins. O ponto crítico da transição nestes sistemas difere do ponto crítico dos exemplos de livro-texto em que se considera um gás ideal homogêneo uma vez que, além da interação entre seus constituintes, estes gases são comumente produzidos em armadilhas harmônicas. (1) A presença de uma segunda espécie atômica introduz um outro desvio ao ponto crítico da transição relacionado às características desta nova espécie (i.e. número de átomos, interação inter- e intraespécie). No caso de misturas bóson-férmion, este desvio é conhecido, porém, no caso de misturas bóson-bóson, esta expressão ainda permanece inédita na literatura. (2) Neste projeto, estudamos o desvio da temperatura crítica devido à interação da segunda espécie tanto no regime térmico, quando no condensado. Este trabalho contempla a parte teórica que será observado em um sistema de Condensados de Bose-Einstein de Sódio em dois estados hiperfinos.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Transição de fase. Misturas bóson-bóson.

Agência de fomento: FAPESP (2021/09920-1)

Referências:

- 1 ALBUS, A. P.; GIORGINI, S.; ILLUMINATI, F.; VIVERIT, L. Critical temperature of bose-einstein condensation in trapped atomic bose-fermi mixtures. **Journal of Physics B**, v. 35, n. 23, p. L511, 2002.
- 2 GIORGINI, S.; PITAEVSKII, L. P.; STRINGARI, S. Condensate fraction and critical temperature of a trapped interacting bose gas. **Physical Review A**, v. 54, n. 6, p. R4633, Dec. 1996.

IC6

Produção de guias de onda volumétricas com pulsos de femtossegundos

TRANZIL, Vinícios Tadeu Rodrigues¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

vinicios.tranzil@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O guiamento da luz é condição necessária para o desenvolvimento de novas tecnologias fotônicas, principalmente em dispositivos de óptica integrada. O desenvolvimento de tais guias em materiais vítreos apresenta vantagens principalmente relativas a tridimensionalidade e robustez mecânica. (1) Vidros de Pirofosfato de metais pesados possuem uma larga janela de transparência e exibem efeitos ópticos não lineares de natureza ultrarrápida. Dessa forma, é possível produzir estruturas de ordem micrométrica nesse tipo de material com o uso de um laser suficientemente intenso. Diante disso, os objetivos do projeto de iniciação científica foram primeiramente avaliar como amostras de vidros de Pirofosfato de Chumbo aos quais foram adicionadas diferentes quantidades de Óxido de Níbio Pb2P2O7-Nb2O5 respondem a pulsos ultracurtos do ponto de vista de microestruturação, bem como produzir as guias de onda neste material. Para tanto, foram feitas as espectroscopias em UV-Vis das amostras a partir das quais foi possível estimar as energias de bandgap de cada uma delas. Além disso, através de método de dano zero proposto por Liu, que diz que existe uma dependência entre a energia por pulso e a espessura das linhas causadas por pulsos laser com perfil de intensidade Gaussiano que é dada por $r_{2th} = (w_0^2 \ln E_p E_{th})$. (2) Fazendo linhas usando diferentes valores de energia por pulso, é possível obter a energia de limiar de dano das amostras que, a partir de $F_{th} = (2E_{th})[\pi w_0^2]$ se chega na Fluência de limiar de dano. Repetindo o processo para diferentes números de pulso, o modelo $F_{th,N} = (F_{th,1} - F_{th,\infty})e^{-k(N-1)} + F_{th,\infty}$ fornece as fluências de limiar de dano para 1 e para infinitos pulsos, bem como, o parâmetro de incubação (k) que é tão maior quanto mais difícil é saturar o material. (3) Além disso, foram medidos os parâmetros de Keldysh para cada uma das seis amostras. Essa quantidade determina qual mecanismo de fotoionização não linear predomina nos processos de microfabricação no material dado. Os resultados até o momento apontam que, para todas as amostras, as absorções são predominantemente de natureza multifotônica.

Palavras-chave: Microfabricação. Pulsos ultracurtos. Óptica não-linear.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 MANZANI, D. *et al.* Highly nonlinear Pb2P2O7-Nb2O5 glasses for optical fiber production. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 443, p. 82-90, July 2016. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2016.04.019.
- 2 LIU, J. M. Simple technique for measurements of pulsed gaussian-beam spot sizes. **Optics Letters**, v. 7, n. 5, p. 196, 1982.
- 3 NOLASCO, L. K. **Investigation of the fs-micromachining process in GaN and diamond.**

2021. Dissertação (Mestrado em Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais)
- Escola de Engenharia São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021. DOI:
10.11606/D.18.2021.tde-22042021-165900.

IC7

Dinâmica de grupos casuais

SANCHES, Matheus Antônio¹; FONTANARI, José Fernando¹

matheus.sanches9@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Grupos Casuais são parte do que rege as relações sociais, pois determinam os grupos que são formados em um determinado espaço. Como numa festa, estudar a formação de diferentes tamanhos de grupo, quem deixa a festa ou quem permanece sozinho, estudar estes comportamentos é estudar a Dinâmica de Grupos Casuais. Portanto, Grupos Casuais são grupos formados de maneira espontânea ou aleatória. O fato de não terem uma estrutura prévia e serem formados apenas para a realização de uma atividade dá aos grupos uma grande liberdade de como podem se organizar, já que, em geral, não há conexões feitas previamente. Alguns exemplos de grupos casuais são: festas ou pausas no trabalho de funcionários em grandes empresas, um grupo voluntário, discussões em fóruns online ou mesmo relações em grupos de animais sociais. Como grupos que tem um grau de liberdade alto em suas conexões, a maneira de como modelar seus comportamentos tende a ser complexa. Portanto, em nosso trabalho escolhemos trabalhar com um modelo mais simples de Dinâmica de Grupos Casuais, o modelo de Dois Grupos, desenvolvido por Harrison White em 1962. (1) Dessa forma, buscando entender de forma básica a Dinâmica de Grupos Casuais e aprender a trabalhar com simulações estocásticas por meio do algoritmo desenvolvido por Gillespie. (2-3) Nesse modelo de Dois Grupos, temos dois parâmetros principais que determinam a probabilidade de haver entrada ou saída de indivíduos no sistema. E a partir desse modelo, foi feito um estudo analítico e estocástico do problema. A análise numérica do problema é baseada na probabilidade da existência de uma formatação dos grupos. Ao utilizar o algoritmo de Gillespie são simulado possíveis processos que podem ocorrer em nosso modelo de forma que é possível estudarmos uma única simulação e vermos sua situação de equilíbrio ou podemos fazer uma média temporal de diversas simulações. A partir dessas análises podemos estudar em detalhe o sistema de Dois Grupos e ter uma melhor compreensão quanto as Dinâmicas de Grupos Casuais.

Palavras-chave: Grupos casuais. Processos estocásticos. Algoritmo de Gillespie.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 WHITE, H. Chance models of systems of casual groups. **American Sociological Association**, v. 25, n. 2, p. 153–172, 1962.
- 2 GILLESPIE, D. T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. **Journal of physical chemistry**, ACS Publications, v. 81, n. 25, p. 2340–2361, 1977.
- 3 GILLESPIE, D. T. A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 22, n. 4, p. 403–434, 1976.

IC8

Estudos sobre a mobilidade da interface NC em septinas

GARRATT, Richard Charles¹; RITS, Caio Augusto¹; ARAÚJO, Ana Paula Ulian de¹

caioaugusto5678@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Septinas são proteínas que se ligam a nucleotídeos de guanina, muitas sendo capazes de hidrolisá-los. São consideradas proteínas citoesqueléticas, participando de diversas funções celulares como a citocinese, exocitose, fagocitose, tráfego de vesículas, entre outras. Ainda, já foi demonstrado que a expressão ectópica, deleção e/ou mutação de genes correspondentes às septinas estão associadas a diversas patologias, incluindo: infertilidade, neuropatias e vários tipos de tumor. As septinas têm como principal característica a capacidade de polimerização, iniciada com a formação de complexos heteroligoméricos. Dentre estes complexos, o melhor já caracterizado é um hexâmero, formado pelas septinas humanas SEPT2, SEPT6 e SEPT7, numa ordem 2-6-7-7-6-2. (1) Alguns estudos mostraram que esse complexo fisiológico pode conter também, duas moléculas adicionais de outra septina, a SEPT9, constituindo assim um octâmero como unidade estrutural. (2) Ambos, hexâmeros e octâmeros, polimerizam-se via suas extremidades para formar filamentos, sendo capazes assim de organizar estruturas mais complexas. Estudos recentes mostraram que, num mesmo filamento, é possível encontrar uma mistura de octâmeros e hexâmeros, sendo que SEPT9 ocupa o centro dos octâmeros (2-6-7-9-9-7-6-2). Estruturas cristalográficas para a SEPT9 (e de outras septinas do mesmo grupo) foram resolvidas, tanto complexadas ao GDP quanto a um análogo de GTP. (3) As estruturas revelaram que a interface NC entre dois monômeros de septinas deste grupo é flexível e, portanto, diferente de todas as demais interfaces encontradas ao longo do filamento. Baseado nesta observação, foi levantada a hipótese de que a flexibilidade desta interface esteja relacionada à ligação e hidrólise de GTP. A consequência da alteração da interface dependente do nucleotídeo ligado seria a movimentação de uma hélice ($\alpha 0$) ora para fora e ora para dentro da interface, podendo esta hélice assumir uma conformação transiente e compatível à interação com membranas. Para comprovar esta hipótese, é necessário produzir e analisar a oligomerização de septinas integrantes do grupo da SEPT9 (SEPT3, SEPT9 ou SEPT12) usando construções que incluam e estabilizem a hélice $\alpha 0$ nas suas possíveis conformações. Estas construções foram idealizadas e, posteriormente, fundamentadas a partir de softwares (AlphaFold, Dynamut e PISA) que exploraram e analisaram numericamente variáveis cruciais para o sucesso das mesmas. Atualmente, as construções estão sendo produzidas experimentalmente para avaliar nossa hipótese.

Palavras-chave: Complexos. Interface NC. Hélice alfa-0.

Agência de fomento: CNPq (126895/2022-8)

Referências:

1 SHEFFIELD, P. J. *et al.* Borg/Septin interactions and the assembly of mammalian septin heterodimers, trimers, and filaments. **Journal of Biological Chemistry**, v. 278, n. 5, p. 3483-3488, Jan. 2003.

DOI: 10.1074/jbc.M209701200.

2 MENDONÇA, D. C. *et al.* An atomic model for the human septin hexamer by cryo-EM. **Journal of Molecular Biology**, v. 433, n. 15, p. 167096, 2021. DOI: 10.1016/j.jmb.2021.167096.

3 CASTRO, D. K. S. V. *et al.* A complete compendium of crystal structures for the human SEPT3 subgroup reveals functional plasticity at a specific septin interface. **International Union of Crystallography Journal**, v. 7, n. 3, p. 462-479, 2020. DOI: 10.1107/S2052252520002973.

IC9

Aplicação de paclitaxel nanoencapsulado com PLGA no tratamento de câncer de pulmão

BARBOSA, Lorany Vitoria dos Santos¹; LEITE, Celisnolia Morais¹; RODERO, Camila Fernanda¹; LEITE, Ana Elisa Tognoli¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

lorany.vitoria@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O câncer de pulmão é um tipo de neoplasia de alta incidência e mortalidade no Brasil e no mundo, sendo diagnosticado, na maioria dos casos, em estágios avançados, o que dificulta o seu prognóstico. (1-2) Diante disso, pesquisas têm explorado novas propostas envolvendo nanotecnologia para aumentar a eficácia e a biodisponibilidade de fármacos no tratamento desse tipo de câncer. Neste estudo desenvolvemos um sistema nanoestruturado de poli(ácido lático-co-glicólico) (PLGA) para a entrega e liberação de paclitaxel (PTX) na terapia do câncer, capaz de modular ou otimizar a ação deste quimioterápico. A técnica de emulsão simples foi utilizada para desenvolver as nanopartículas (NPs) poliméricas contendo PTX, que apresentaram um tamanho médio de $161,7 \pm 7,4$ nm, índice de polidispersão (PDI) $0,17 \pm 0,02$ e potencial zeta de $-23,2 \pm 3,2$ mV. Outras análises físicoquímicas estão em andamento para melhorar a caracterização das NPs, além do ensaio de viabilidade e internalização celular. O desenvolvimento desse nanossistema é, portanto, significativo na busca por novas abordagens terapêuticas para o tratamento de câncer de pulmão.

Palavras-chave: Nanopartículas poliméricas. Câncer de pulmão. Paclitaxel.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

1 BRASIL. Ministério da Saúde. Instituto Nacional de Câncer. **Câncer**. 2023. Disponível em: <https://www.gov.br/inca/pt-br/assuntos/cancer>. Acesso em 03 jul. 2023.

2 WORLD HEALTH ORGANIZATION. International Agency for Research on Cancer. **Cancer today**. 2023. Disponível em: <https://gco.iarc.fr/today/home>. Acesso em 03 jul 2023.

IC10

Lactonas ativas em linhagem tumoral metastática de mama

RAFAEL, Larissa Daniela Dias¹; SOUZA, Matheus da Silva²; COELHO, Fernando Antonio Santos³; ANDRICOPULO, Adriano Defini²; SILVA, Thiago Sabino da³

larissaddias.rafael@usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP; ²Instituto de Física de São Carlos – USP; ³Instituto de Química - UNICAMP

O câncer é considerado um problema de saúde pública, com diversos subtipos, como é o caso do câncer de mama, que apresenta dezenove subdivisões principais. Entre elas, destaca-se o câncer de mama triplo-negativo (TNBC, triple-negative breast cancer), que é uma das formas mais agressivas da doença. O TNBC é caracterizado pela ausência dos receptores de progesterona e estrogênio, além da amplificação do receptor tipo 2 do fator de crescimento epidérmico humano (HER2), o que contribui para prognósticos desfavoráveis, tardios e altas taxas de metástase cerebral e pulmonar. Nas últimas décadas, houve avanços promissores no tratamento do TNBC, embora ainda existam desafios significativos. (1-3) Uma área de grande interesse é a utilização de produtos naturais em estratégias terapêuticas combinadas, como as lactonas. Neste projeto, foi realizada uma triagem biológica inicial de compostos bioativos conhecidos como lactonas, planejados para atuarem na proteína tubulina, que é o alvo molecular do estudo, influenciando sua capacidade de polimerização e inibindo seletivamente a proliferação de células TNBC da linhagem MDA-MB-231. Para isso, três compostos sintéticos de lactonas foram selecionados com base em ensaios prévios de citotoxicidade *in vitro*, com índice de seletividade (IS) superior a 9 (MDA-MB-231 em comparação com fibroblastos humanos saudáveis, HFF-1), e investigados em fibroblastos não-tumorais da pele humana (HFF-1). Os resultados mostraram um perfil promissor de seletividade citotóxica, fornecendo evidências para a continuação da investigação e caracterização das três moléculas. Além disso, a potência biológica dos compostos em relação à inibição da migração e invasão celular foi avaliada por meio de ensaios quantitativos em câmara de Boyden, revelando que as lactonas possuem ordens de potência semelhantes, e a substituição de um metoxibenzeno por um bromobenzeno não resultou em alterações significativas. A modulação da tubulina pelos compostos foi avaliada por meio de um ensaio de polimerização *in vitro* da proteína, utilizando o composto fluorescente DAPI, que se liga preferencialmente aos microtúbulos em vez dos dímeros livres de tubulina. A triagem realizada em concentração única (100 μ M) identificou todos os compostos como inibidores de polimerização da tubulina.

Palavras-chave: Câncer de mama. Química medicinal. Ensaios celulares.

Agência de fomento: CNPq (126187/2022-3)

Referências:

1 BIANCHINI, G. *et al.* Triple-negative breast cancer: challenges and opportunities of a heterogeneous disease. **Nature Reviews Clinical Oncology**, v. 13, n. 11, p. 674–690, 2016. DOI: 10.1038/nrclinonc.2016.66.

2 GUO, B. *et al.*. Co-delivery of gemcitabine and paclitaxel plus NanoCpG empowers chemoimmunotherapy of postoperative “cold” triple-negative breast cancer. **Bioactive Materials**, v. 25, p. 61–72, 2023. DOI: 10.1016/j.bioactmat.2023.01.014.

3 KALEEM, M. *et al.*. Epigenetics of triple-negative breast cancer via natural compounds. **Current Medicinal Chemistry**, v. 29, n. 8, p. 1436–1458, 2021. DOI: 10.2174/0929867328666210707165530.

IC11

Estudos de taxa de troca molecular entre poros multiescala de rochas reservatórioBONAGAMBA, Tito¹; CAMPOS, Nataly¹; MARASSI, Agide¹

natalymelo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Em um meio poroso, há constante interação de diferentes fluidos, por exemplo água e óleo, além da comunicação entre regiões de características variadas cujas moléculas encontram-se em movimento de translação devido à autodifusão. Dessa forma, há necessidade de caracterização da estrutura e dinâmica das moléculas de um fluido confinado, como também, obtenção de propriedades físico-químicas do meio confinante. Diante desta relevância, a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) apresenta técnicas avançadas e constitui umas das mais importantes ferramentas na caracterização de meios porosos. Em suma, a partir de métodos computacionais de reconstrução de Meios Porosos Digitais (MPD) e experimentos de RMN, aplica-se a teoria de relaxometria, a partir da compreensão da equação de Bloch e processos de difusão descritos pelas Leis de Fick. Desse modo, a fim de analisar a conectividade entre poros de tamanhos distintos no meio poroso, onde as moléculas confinadas encontram-se sob efeitos difusivos, foi implementado e simulado computacionalmente o experimento de T_2 -Filtered- T_2 - T_2 Exchange.(1): uma nova proposta do Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução por RMN (LEAR), sendo uma implementação do experimento de T_2 - T_2 Exchange proposto por Lee.(2) Assim, uma das análises consistiu na obtenção de dados experimentais para amostras de rochas carbonáticas e areníticas, confeccionadas em formato de *plug*.cilíndricos de 10x20 mm, a fim de observar os efeitos de troca entre os diferentes poros das amostras. Outra abordagem consistiu na implementação de modelos numéricos das equações de troca, onde foi estudado a máxima intensidade de sinal a ser observado por RMN considerando um modelo de dois poros. Estas análises trazem elementos importantes para entender o experimento de *Exchange*.entre diferentes poros. O principal desafio do experimento T_2 - T_2 Exchange.está em estimar os parâmetros relacionados às taxas de troca. Isso ocorre devido à baixa quantidade de sinal presente na microporosidade, muitas vezes sendo menor que 5% do sinal total, sendo fortemente afetada pelo ruído presente no sinal. Além disso, esta componente de sinal surge na distribuição de tempos de relaxação variando tanto em amplitude quanto em posição quando utilizado o método convencional da transformada de Laplace. Todavia, foi constatado que o experimento de T_2 -Filtered- T_2 - T_2 Exchange.é mais rápido, permitindo o estudo mais profundo dos efeitos de troca e relaxação em meios porosos, podendo assim ser inserido em uma ampla gama de aplicações, como no estudo de rochas reservatório em laboratório.

Palavras-chave: Meios porosos multiescala. Taxa de troca. T_2 - Filtered- T_2 - T_2 Exchange.**Agência de fomento:** CNPq (125220/2022-7)**Referências:**

1 D'EURYDICE, M.N.; MONTRAZI, E.T.; FORTULAN, C.A.; BONAGAMBA, T.J., T_2 - *Filtered*. T_2 - T_2 Exchange.NMR, **Journal Chemical Physics**, v. 144, n. 20, p. 204201, 2016. DOI: 10.1063/1.4951712.

2 MONTEILHET, L.; KORB, J.-P.; MITCHELL, J.; MCDONALD, P.J. Observation of exchange of micropore water in cement pastes by two-dimensional T_2 - T_2 exchange nuclear magnetic resonance relaxometry, **Physical Review E**, v. 74, n. 6, p. 061404, Dec. 2006. DOI: 10.1103/PhysRevE.74.061404.

IC12

Cooperação e competição na evolução pré-biótica

FONTANARI, José Fernando¹; MARIANO, Matheus Stefanini¹

matheussmariano@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos problemas fundamentais em evolução pré-biótica é explicar a coexistência de moléculas autorreplicadoras estruturalmente distintas, condição necessária para o surgimento e estabilização de aglomerados moleculares suficientemente complexos capazes de codificar (ou até mesmo atuar como) um metabolismo rudimentar. Modelos clássicos de evolução pré-biótica, como o modelo de quase-espécies (1), não permitem esse tipo de coexistência: apenas o replicador mais eficiente e seus mutantes estruturalmente similares sobrevivem. Uma solução é a introdução de elementos cooperativos na dinâmica de interação molecular, originalmente puramente competitiva, levando aos ciclos moleculares catalíticos, denominados hiperciclos. A dificuldade é que os hiperciclos são vulneráveis à invasão de replicadores mutantes não cooperativos (parasitas), ou seja, moléculas autorreplicadoras que não catalisam a replicação de nenhuma outra molécula do ciclo.(2) Neste projeto, vamos explorar como os princípios que garantem a evolução e manutenção da cooperação na natureza podem ser utilizados para proteger os hiperciclos contra parasitas. Como tanto o surgimento de replicadores mutantes como a evolução da população próxima da extinção necessitam de uma formulação capaz de descrever a dinâmica de um número pequeno de replicadores (3), vamos utilizar o algoritmo de Gillespie para simular a versão estocástica das equações de cinética química que caracterizam os vários modelos clássicos de replicadores.

Palavras-chave: Evolução molecular. Modelagem matemática em biologia. Simulação determinística e estocástica.

Agência de fomento: FAPESP (2022/05544-8)

Referências:

- 1 EIGEN, M. Selforganization of matter and the evolution of biological macromolecules. **Die Naturwissenschaften**, v. 58, n. 10, p. 465–523, 1971.
- 2 MICHOD, R. E. Population biology of the first replicators: On the origin of the genotype, phenotype and organism. **Integrative and Comparative Biology**, v. 23, n. 1, p. 5–14, 1983.
- 3 GILLESPIE, Daniel T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. **Journal of Physical Chemistry**, v. 81, n. 25, p. 2340-2361, 1977.

IC13

Cadeia de Kitaev acoplado a um ponto quântico

COSTA, Gustavo Fernandes da¹; MENEZES, José Carlos Egues de¹; PENTEADO, Poliana Heiffig¹

gustavofernandesdc@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Este projeto tem como objetivo introduzir o estudo dos fundamentos da mecânica quântica por meio da resolução de problemas simples encontrados em muitos livros-texto, como o caso da partícula em uma caixa submetida a diferentes potenciais. (1) Visando aprimorar e aplicar as técnicas computacionais adquiridas durante o curso, desenvolvemos programas para resolver numericamente a equação de Schrödinger utilizando o método das diferenças finitas. Os resultados obtidos foram comparados com soluções analíticas, para assim analisar a precisão obtida, algo muito importante quando se trata de soluções numéricas. Através do uso de técnicas computacionais, pudemos visualizar de maneira mais intuitiva o comportamento das equações que governam os fenômenos quânticos além de desenvolver habilidades essenciais no desenvolvimento de programas e na interpretação dos resultados obtidos. Essa capacidade será altamente relevante para resolver problemas mais desafiadores que não possuam soluções analíticas diretas. Como próximo passo, planejamos aplicar essas técnicas para investigar o modelo de Kitaev contínuo acoplado a um ponto quântico.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger. Método das diferenças finitas. Modelo de Kitaev.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

1 GRIFFITHS, D. J., SCHROETER, D. F. **Introduction to quantum mechanics**. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.

IC14

Desenvolvimento de nanoestruturas de $g\text{-C}_3\text{N}_4$ à partir da pirólise da ureia: estudo da atividade fotocatalítica para geração de H_2 verdeMARCELINO, Giuseppe Braz da Silva¹; GONÇALVES, Renato Vitalino¹

giumarcelino@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A fotocatalise da água é um processo promissor para a conversão da energia solar em hidrogênio verde, abordando questões globais relacionadas à energia e ao meio ambiente. Entre os materiais utilizados nesse processo, as nanoestruturas de nitreto de carbono grafítico ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) se destacam por sua síntese relativamente simples e não tóxica, além de apresentarem características estruturais e eletrônicas suficientemente adequadas para reduzir e oxidar a molécula da água. (1) No presente trabalho, foram sintetizadas amostras de $g\text{-C}_3\text{N}_4$ em três temperaturas diferentes: 600°C, 650°C e 700°C. Realizamos estudos detalhados das propriedades ópticas e eletrônicas dos materiais sintetizados, utilizando técnicas como difração de raios X, espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (XPS) e espectroscopia UV-Vis. Adicionalmente, foram realizadas deposições de co-catalisadores nas amostras, utilizando uma solução de rutênio em concentrações de 0,5%, 1% e 2% em massa. Nossos resultados demonstraram que a deposição dos co-catalisadores aumentou significativamente a produção de H_2 , sendo que a amostra sintetizada a 650°C e impregnada com 0,5% de rutênio apresentou a maior produção. As reações de fotólise da água foram conduzidas em um sistema de reator de quartzo acoplado a um cromatógrafo gasoso. Como fonte de irradiação, utilizamos uma lâmpada de xenônio juntamente com um filtro AM 1.5 G para simular a luz solar.

Palavras-chave: Hidrogênio verde. Fotocatalise. Nanoestruturas.**Agência de fomento:** CNPq (126252/2022-0)**Referências:**

1. ZHANG, B.; SUN, L. Artificial photosynthesis: opportunities and challenges of molecular catalysts. *Chemical Society Reviews*, v. 48, n. 7, 2216-2264, Apr. 2019.

IC15

Dinâmica de fluidos computacional em aneurisma cerebral utilizando imagens angiográficas

DERRICO, Felipe Ferraz¹; PAIVA, Fernando Fernandes¹; SOLCIA, Gustavo¹

felipe_derrico_ferraz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com a democratização do poder computacional, a dinâmica de fluidos computacional (DFC) passou a ser utilizada nas mais diversas áreas do conhecimento. Uma das áreas de maior potencial é a ciência médica com aplicações de hemodinâmica computacional para estudar pacientes e sujeitos saudáveis. Pensando em aplicações de técnicas de DFC no estudo de artérias de pacientes com aneurismas cerebrais, realizamos um estudo dos principais métodos de imagens angiográficas e de anatomia, em especial do círculo de Willis pela grande ocorrência de aneurismas nesta região. (1) Para familiarização com os softwares, foi realizado um estudo de caso. Utilizamos o software de dinâmica de fluidos computacional OpenFOAM para comparar métodos numéricos e analíticos no caso da equação de Poiseuille. (2) Este estudo motivou a discussão da analogia eletrônico-hidráulica, que vem a ser a base para simulações hemodinâmicas. (3) Ao todo, doze simulações em cilindros foram analisadas, sendo quatro em cada uma das classes: cilindro (C), cilindro com afunilamento (A) e cilindro com afunilamento e extensão (E). Casos de uma mesma classe se diferenciaram nas condições de contorno e nos parâmetros geométricos de forma que fosse possível analisar o impacto destas mudanças no perfil de velocidade e na vazão. Todas as simulações foram executadas em estado estacionário e para isto o número de Reynolds foi checado. Por fim, concluímos com este estudo que os métodos numéricos satisfazem a equação de Poiseuille, assim como a analogia eletrônico-hidráulica.

Palavras-chave: Dinâmica de fluidos computacional. Analogia eletrônico-hidráulica. Equação de Poiseuille.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

- 1 KEEDY, A. An overview of intracranial aneurysms. **McGill Journal of Medicine**, v. 9, n. 2, p. 141-146, 2006.
- 2 WELLER, H.G., *et al.* A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. **Computers in Physics**, v. 12, n. 6, p. 620-631, 1998. DOI: 10.1063/1.168744.
- 3 PFITZNER, J. Poiseuille and his law. **Anaesthesia**, v.31, n. 2, p. 273-275, 1976. DOI: 10.1111/j.1365-2044.1976.tb11804.x.

IC16

Seleção de grupo: entendendo o conflito entre o bem coletivo e o interesse individual

FONTANARI, José Fernando¹; ZAMPRONIO, Angelo Antonio Vernaschi¹

angelozampronio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é estudar a dinâmica de uma economia baseada no jogo do bem público e os efeitos que diferentes estratégias possuem nesta. A estratégia de um indivíduo consiste em um algoritmo a ser seguido durante as interações com o meio e os demais indivíduos. Em cada modelo, será analisada a estabilidade da população, isto é, se o ganho médio da população varia ou não e o ganho médio total na economia. O jogo do bem público é um modelo aplicado para se estudar a cooperação entre uma população que depende entre si para atingir um resultado ótimo, havendo estratégias egoístas dentro dessa população. Tais estratégias se beneficiam em relação às demais, porém prejudicando o resto dos jogadores, assim como a si mesmas a longo prazo. A dinâmica irá funcionar da seguinte maneira: Cada iteração irá separar aleatoriamente uma população de diferentes estratégias em grupos de tamanho N, onde os jogadores do grupo irão jogar entre si. Após o jogo, cada jogador irá comparar seu ganho com outro jogador aleatório do mesmo grupo e, caso o ganho for menor, o jogador irá imitar a estratégia do outro e, se os ganhos forem iguais, existe uma chance de cinquenta por cento do jogador imitar a outra estratégia. Essa dinâmica será analisada tanto de forma analítica como computacional, utilizando processos estocásticos, como as cadeias de Markov, na primeira abordagem, e simulações numéricas na segunda. (1)

Palavras-chave: Cadeias de Markov. Simulação Numérica. Ciências Sociais.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

1 SIGMUND, K.; DE SILCA, H.; TRAULSEN, A.; HAUERT, C. Social learning promotes institutions for governing the commons. **Nature**, v. 466, n. 7308, p. 861-863, Aug. 2010.

IC17

O método variacional de Monte Carlo aplicado a bósons interagentes aprisionados em uma armadilha harmônica

MADEIRA, Lucas¹; KÜL, João Octavio¹

joaooctaviokul02@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A simulação numérica de sistemas físicos é essencial para o estudo da física, pois os modelos teóricos dos sistemas da natureza, cada vez mais realistas, são também cada vez mais complexos. Os métodos de Monte Carlo quântico são abordagens de muitos-corpos que fornecem cálculos precisos em sistemas fortemente interagentes e têm sido aplicados com sucesso em física atômica. Calculamos propriedades de bósons interagentes e aprisionados em uma armadilha harmônica utilizando o método variacional de Monte Carlo. O algoritmo é baseado no princípio variacional, o qual fornece um limite superior para a energia do estado fundamental, e o Monte Carlo está relacionado com o cálculo das integrais multidimensionais necessárias. (1) Propomos funções de onda variacionais que capturam as propriedades físicas do estado fundamental desse sistema e calculamos propriedades de interesse, como a energia e distribuições espaciais. (2) Havendo tempo, vamos considerar também o método de difusão de Monte Carlo, um método capaz de projetar a componente do estado fundamental a partir de uma função de onda variacional.

Palavras-chave: Simulação numérica. Monte Carlo. Bósons interagentes.

Agência de fomento: CNPq (465360/2014-9)

Referências:

- 1 REIS, M. A.; VITIELLO, S. A. The Monte Carlo variational method applied to the quantum harmonic oscillator. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 28, n. 1, p. 45-50, 2006.
- 2 DUBOIS, J. L.; GLYDE, H. R. Bose-Einstein condensation in trapped bosons: a variational Monte Carlo analysis. **Physical Review A**, vol. 63, n. 2, p. 023602-1 - 023602-10, 2001.

IC18

Simetrias e interações fundamentais: uma introdução às teorias de Yang-MillsSILVA, Caio Angelo da¹; FERREIRA, Luiz Agostinho¹

caioangelodasilva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na formulação do Eletromagnetismo clássico, a introdução de potenciais $A_\mu = (\phi, -\mathbf{A})$ vem acompanhada de um resultado interessante: as equações de Maxwell são invariantes por transformações da forma $A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \alpha(x)$, sendo $\alpha(x)$ uma função arbitrária (bem comportada) do espaço-tempo. Essas chamadas transformações de gauge, que no Eletromagnetismo clássico apontam apenas para uma arbitrariedade na escolha dos potenciais, adquirem uma importância teórica maior no contexto da Mecânica Quântica, onde observa-se que, na presença de campos eletromagnéticos, com os potenciais transformando de acordo com a equação anterior, as previsões da teoria são invariantes por transformações locais $\psi \rightarrow \exp[-iq\alpha(x)/\hbar] \psi$ da função de onda do sistema, o que corresponde portanto a uma simetria interna da Mecânica Quântica nesse caso. (1) Em outras palavras, obtemos que a imposição de invariância por transformações locais de fase da função de onda corresponde à introdução da interação eletromagnética na teoria. No caso, é simples ver que essas transformações se relacionam com o grupo de simetria abeliano $U(1)$. No presente trabalho, veremos como essa ideia pode ser generalizada para grupos de simetria não abelianos $SU(N)$, o que dá origem às chamadas Teorias de Gauge Não Abelianas, também conhecidas como Teorias de Yang-Mills, responsáveis por introduzir não só a interação eletromagnética como também as interações fraca e forte no Modelo Padrão da Física de Partículas. (2) Em particular, veremos conceitos importantes como os de campos de gauge, derivada covariante e tensor dos campos no caso não abeliano e a relação das Teorias de Yang-Mills com Grupos e Álgebras de Lie e Teoria de Representação. (3)

Palavras-chave: Teorias de Yang-Mills. Grupos e álgebras de Lie. Física das partículas elementares e campos.

Agência de fomento: FAPESP (2023/04292-8)

Referências:

- 1 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum Mechanics**, 2nd ed. Berlin: Wiley-VCH, 2019. v. 1.
- 2 GRIFFITHS, D. **Introduction to elementary particles**. 2nd ed. Berlin: Wiley-VCH, 2008. 470p.
- 3 FERREIRA, L. A. **Teorias de Gauge não abelianas e sólitons**. 2021. Disponível em: <https://eaulas.usp.br/portal/course.action?course=29528>. Acesso em: 2 jul. 2023.

IC19

Estudo de correlações temporais em átomos frios

FRITSCH, Amilson Rogelso¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; ARMIJOS, Michelle Alejandra Moreno¹; SILVA, Leonardo Lima da¹

leonardols.silva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Fótons emitidos por uma nuvem de átomos carregam informação sobre a dinâmica dos átomos. A correlação entre fótons emitidos por átomos individuais nos fornece informações sobre efeitos que ocorrem entre os átomos e seu comportamento coletivo. Este tipo de estudo começou a ser implementado recentemente em átomos frios graças ao desenvolvimento dos equipamentos utilizados, possibilitando um melhor entendimento dos efeitos coletivos dos átomos e também da interação luz-matéria. Para a análise dos fótons espalhados, normalmente é feita a coleta de fótons em dois fotodetectores ultra rápidos e uma análise estatística é feita utilizando o número de fótons coletados e/ou do tempo de chegada destes fótons em um dos fotodetectores em relação à chegada de fótons no outro detector. Para a medida quantitativa utilizamos a correlação temporal de intensidade dos fótons, conhecida como $g_2(\tau)$, função que mede a probabilidade de detectar um segundo fóton a um tempo τ após o primeiro fóton. Esta função mostra muito sobre o tipo de distribuição atômica que emitiu os fótons. Por exemplo, no caso de uma luz incoerente com muitos partículas em um movimento caótico é possível mostrar que $g_2(\tau = 0) = 2$. (1) Já no caso da emissão de luz por um laser, $g_2(\tau = 0) = 1$. (2) A distribuição temporal da função de correlação mostra a dinâmica dos átomos, como por exemplo, os efeitos de espalhamento coletivo e também sobre a distribuição de velocidade dos átomos. (3)

Palavras-chave: Átomos frios. Correlação temporal de fótons. Efeitos coletivos em átomos.

Agência de fomento: FAPESP (2022/14084-0)

Referências:

- 1 TAN, P. K. *et al.* Measuring temporal photon bunching in blackbody radiation. **The Astrophysical Journal Letters**, v. 789, p. L10-1-L10-5, July 2014.
- 2 SHAFI, K. Muhammed *et al.* Time-delayed intensity–interferometry of the emission from ultracold atoms in a steady-state magneto-optical trap. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, v. 49, n. 2, p. 025301-1-025301-7, 2016.
- 3 ESPIRITO SANTO, T. S. *et al.* Collective excitation dynamics of a cold atom cloud. **Physical Review A**, v. 101, p. 013617-1-013617-10, 2020.

IC20

Avaliação dos efeitos da luz UV-C sobre a espécie vegetal *Allium cepa*

SOUZA, Mariana de¹; GARBUIO, Matheus²; INADA, Natalia Mayumi¹; SAMMARRO, Kamila Jessie¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; LIMA, Alessandra Ramos¹

pantesouza@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

A luz ultravioleta pode ser classificada em UV-A, UV-B e UV-C, de acordo com a ordem decrescente de comprimento de onda. A luz UV-A, emitida pelo sol, não apresenta riscos à saúde humana e é capaz de induzir o bronzeamento, sem causar danos à pele. A faixa UV-B está associada a efeitos prejudiciais à saúde, incluindo envelhecimento precoce, reações cutâneas, manchas solares e câncer de pele, enquanto a radiação UV-C é completamente absorvida pela atmosfera terrestre, não atingindo a superfície do planeta através da luz solar natural. No entanto, ela pode ser produzida artificialmente, e é de interesse devido às suas propriedades germicidas. (1) Nesse sentido, a radiação UV-C tem sido amplamente utilizada para fins de desinfecção, como no tratamento de água para consumo, purificadores de ar portáteis, unidades de desinfecção em hospitais, laboratórios e indústrias. Entretanto, a exposição direta à UV-C pode ser prejudicial à saúde humana, mas seu efeito não é muito explorado em organismos vegetais. Nesse sentido, algumas plantas são reconhecidas como modelos para detectar toxicidade ambiental, a exemplo da espécie *Allium cepa*, a qual vem sendo empregada como organismo-teste para avaliação de efeito fitotóxico de compostos químicos e contaminantes, etc., destacando sua sensibilidade em relação a plantas superiores. Neste trabalho, buscou-se avaliar e quantificar respostas da exposição à radiação UV-C (254 nm) sobre células de *A. cepa*, considerando que os efeitos são bem definidos em literatura e frequentemente utilizados para avaliação de parâmetros tais como o potencial citotóxico, genotóxico e mutagênico. (2) As sementes de *A. cepa* (Isla Sementes Ltda.) variedade Baia Periforme, livres de agrotóxicos foram utilizadas. As análises realizadas de acordo com o protocolo desenvolvido pelo Laboratório de Mutagênese Ambiental (LMA) do Instituto de Biociências da Universidade Estadual Paulista (UNESP- Rio Claro). (3) Sementes de *A. cepa* foram dispostas em placa de Petri forradas com papel filtro e submetidas a germinação a $23^{\circ} \pm 2^{\circ} \text{C}$ em fotoperíodo 12h:12h com umidade relativa de $60 \pm 10\%$ durante 96 horas, regadas com água destilada ($n = 30$ sementes, triplicata). As raízes com aproximadamente 1cm foram expostas a um tratamento temporário, sendo irradiadas a 254 nm nas doses 0,207, 1, 6, 9, 12 J/cm² (lâmpada de Germicidal OSRAM, 8 W). As raízes tratadas foram fixadas e realizou-se análises macroscópicas e microscópicas. Verificou-se a inibição em todos os processos da germinação e desenvolvimento da semente, demonstrando potencial genotóxico e mutagênico da irradiação com o UV-C nas células meristemáticas das raízes de *A. cepa*. Portanto, os resultados sugerem que a ação da dose-resposta apresentou prejuízo em todas as condições testadas e fomentam estudos para definição de um threshold de efeitos sobre as plantas.

Palavras-chave: *Allium cepa*. Ultravioleta. Biofotônica ambiental.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 ÇAVUŞOĞLU, K. *et al.* Comparative investigation of toxicity induced by UV-A and UV-C radiation using Allium test. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 29, n. 23, p. 33988-33998, 2022. DOI: 10.1007/s11356-021-18147-1.
- 2 LEME, D. M.; MARIN-MORALES, M. A. Allium cepa test in environmental monitoring: a review on its application. **Mutation Research/Reviews in Mutation Research**, v. 682, n. 1, p. 71-81, 2009. DOI: 10.1016/j.mrrev.2009.06.002.
- 3 MARIN-MORALES, M. **Utilização de Allium cepa como organismo teste para detecção de genotoxicidade ambiental**. Rio Claro, SP: Unesp, 2023. Projeto de Pesquisa.

IC21

Magnetization processes in frustrated magnets

ANDRADE, Eric de Castro e¹; DOMINGUES, Gabriel Capelo¹

gcapelo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Frustrated magnets often display novel states, ranging from ordered states induced by fluctuation to disordered quantum spin liquids states. One remarkable effect of frustrated magnets in the presence of an external field is the stabilization of a magnetization plateau. This is a semiclassical effect, in contrast to the quantum hall effect, for example, and is observed experimentally in several triangular lattice compounds. Here we delve into the richness of this phenomenon, beginning with the study of the classical limit of the antiferromagnetic Heisenberg model in a triangular lattice. This model shows a massive accidental degeneracy in the ground state when there is an external magnetic field. We then introduce thermal fluctuations employing a real space perturbation theory, which lifts the degeneracy via an order-by-disorder mechanism. (1) In particular, this generates an effective biquadratic exchange term in the Hamiltonian. By minimizing the new Hamiltonian, we can determine the phases of the system in each interval of the magnetic field, and the phase transitions are studied in detail. Once the classical limit is understood, we use spin-wave theory (2) to move to the quantum case. The method consists of a $1/S$ series expansion – where S is the spin size – with the starting point corresponding to the classical ground state. Because of the noncollinearity of the classical spin configuration, rotations to the local axis in each site are introduced. (3) Truncating the series in first order, we can qualitatively explain the appearance of the magnetization plateau. Magnetization curves are obtained for different values of S , demonstrating that the plateau width is a function of S . This approach illustrates how some insightful ideas can be developed in understanding the characteristic plateau in frustrated systems.

Palavras-chave: Magnetismo frustrado. Platôs de magnetização. Transições de fase.

Agência de fomento: FAPESP (2021/13310-4)

Referências:

- 1 MARYASIN, V. **Order by structural disorder and field effects in frustrated systems**. 2015. 122 p. Thesis (Physique Theorique) - École Doctorale de Physique, Université Grenoble Alpes, Alpes, 2015.
- 2 ZHITOMIRSKY, M. E.; NIKUNI, T. Magnetization curve of a square lattice Heisenberg antiferromagnet. **Physical Review B**, v. 57, n. 9, p. 5013-5016, 1998.
- 3 COLETTA, T. *et al.* Semiclassical theory of the magnetization process of the triangular lattice Heisenberg model. **Physical Review B**, v. 94, n. 7, p. 075136-1-075136-10, 2016.

IC22

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

CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha¹; ARGENTIN, Marcela Nunes¹; CANDIDO, Vitória Tozetti¹
vitoriatcandido@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Durante a “era dourada” dos antibióticos (1940 a 1950), quase todos os grupos de antibióticos utilizados atualmente foram descobertos. (1) Entretanto, apesar de a descoberta dos antibióticos ter revolucionado o tratamento médico, o uso indiscriminado destes fármacos levou à seleção de microrganismos resistentes. Entre estes microrganismos resistentes, um grupo de agentes patogênicos responsáveis pela maioria das infecções relacionadas à assistência em saúde (IRAS) se destaca: os patógenos “ESKAPE”. A sigla corresponde às iniciais dos seguintes agentes: *Enterococcus faecium*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa* e *Enterobacter*. spp., os quais tornaram ainda mais urgente a busca e desenvolvimento de novos fármacos que combatam as IRAS. (2) Frente a isso, desde 2013, o Centro de Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar) tem como objetivo identificar novos compostos com atividades biológicas para estes e outros agentes patogênicos e o Laboratório de Epidemiologia e Microbiologia Moleculares (LEMiMo) realiza os ensaios antibacterianos, buscando extratos, substâncias isoladas e sintéticas que tenham atividade contra uma lista específica de bactérias representantes dos ESKAPE. Inicialmente, realiza-se uma triagem para detecção de atividade antibacteriana e, posteriormente, são determinadas a concentração inibitória mínima (CIM) e a concentração bactericida mínima (CBM) para verificar se a atividade é bactericida ou bacteriostática. Juntamente a estes testes, pretende-se verificar se os compostos conseguem erradicar biofilmes bacterianos *in vitro*. A triagem inicial é realizada com todos os compostos e consiste em verificar a atividade do composto contra as linhagens ATCC na concentração de 512 µg/mL. Caso haja inibição do crescimento nesta concentração em comparação com o controle, a CIM e a CBM serão determinadas. A faixa de concentração das substâncias testadas para a determinação da CIM é de 512 a 0,0625 µg/mL como recomenda a norma M7-A10 descrita pelo *Clinical and Laboratory Standards Institute*. (3) Após a incubação, o crescimento e leitura visual dos resultados, uma alíquota do meio onde apresentaram inibição do crescimento bacteriano será semeada em placas de Petri com meio sólido para se determinar a CBM. No período de agosto de 2022 a julho de 2023, 153 compostos foram recebidos no LEMiMo. Dentre estes compostos, 54 apresentaram atividade na triagem, representando um percentual de 35,3% de todos os compostos. Os compostos testados que apresentaram atividade antibacteriana foram mais ativos contra bactérias gram-positivas nas seguintes proporções: *S. epidermidis*.ATCC 35984 (32,0%), *S. aureus*.ATCC 25923 (30,7%) e *S. aureus*.ATCC 8095 (24,2%). Por outro lado, poucos compostos apresentaram atividade contra as linhagens *P. aeruginosa*.(5,2%), *A. baumannii*.(7,2%) e *K. pneumoniae*.(7,2%). Nossos resultados mostram que há mais facilidade de encontrar compostos contra bactérias gram-positivas como indica a literatura. (1) A próxima etapa do trabalho incluirá a realização de ensaios de erradicação de biofilme.

Palavras-chave: Antibiótico. ESKAPE. Atividade antibacteriana.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

- 1 BÉRDY, J. Bioactive microbial metabolites: a personal view. **Journal of Antibiotics**, v. 58, n. 1, p. 1-26, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1038/ja.2005.1>.
- 2 TOMMASI, R. *et al.* ESKAPEing the labyrinth of antibacterial discovery. **Nature Reviews Drug Discovery**, v. 14, n. 8, p. 529-542, Aug. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1038/nrd4572>.
- 3 CLINICAL AND LABORATORY STANDARDS INSTITUTE. **Methods for dilution antimicrobial susceptibility tests for bacteria that grow aerobically**. 10th. ed. Wayne, PA: CSLI, 2015. 87 p. CLSI Document M07-A10 (v. 35, n. 2).

IC23

1H time domain NMR as a toll for probing distribution of metal ions adsorbed in modified sugar-cane bagasse bioadsorbents

FILGUEIRAS, Jefferson Gonçalves¹; GURGEL, Leandro Vinicius Alves²; GARCIA, Rodrigo Henrique dos Santos³; AZEVÊDO, Eduardo Ribeiro de³; MENDES, Stefano Calabrez³; MAIA, Luisa Cardoso⁴; CARVALHO, Megg Madonyk Cota Elias⁴

stefanocmendes@usp.br

¹Instituto de Química - UFF; ²Departamento de Química - UFOP; ³Instituto de Física de São Carlos – USP; ⁴Universidade Federal de Ouro Preto - UFOP

1H time domain nuclear magnetic resonance (1H TDNMR) was used to investigate the Cu+2 ions adsorbed in the pore structure of a bioadsorbent constituted of polycarboxylated units grafted in the cellulose surface of sugarcane bagasse (PSB). Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG) and Gradient-T2 (GT2) correlations experiments were applied to probe T2 relaxation and diffusion of water confined in the inner pores of the samples, providing information on the pore sizes and internal magnetic field gradients (IMFG) distributions within the pore structure. T2 distribution profiles from clean bio-adsorbents, i.e., no ion metal adsorbed, were similar to that of pristine sugarcane bagasse (SB), showing components associated to three pore categories. A direct comparison between the T2 distribution of confined water in clean and Cu(II) saturated bio-adsorbent revealed that the mean T2 value of all components were decreased by to the ion adsorption. CPMG experiments with varying echo times were conducted and processed as described by Hurlimann to estimate the IMFG distributions. (1) The results showed a distribution with three components, which change consistently with the metal ion adsorption, reducing the average values and changing the relative population (intensity) of each component. More specifically, the results suggested that adsorption occurs on the surface of all pores in the SB structure but is more effective in pores with dimension of few micrometers. Two-dimensional G-T2 experiments confirmed the correspondence between the changes in the IMFG and T2 distributions due to the Cu(II) adsorption. This study demonstrates the capacity of 1H TDNMR techniques to provide valuable insights on the metal adsorption by modified SB samples, highlighting its potential to help with the optimization of materials used in environmental remediation and pollutant adsorption processes.

Palavras-chave: 1H TD-NMR. Modified biomass. Metal adsorption.

Agência de fomento: PUB-USP (PUB-1849)

Referências:

1 HÜRLIMANN, M. D. Effective gradients in porous media due to susceptibility differences. **Journal of magnetic resonance**, v. 131, n. 2, p. 232-240, 1998. DOI: <https://doi.org/10.1006/jmre.1998.1364>.

IC24

Dados intransitivos

PIMENTA, João Victor Alcantara¹; LIMA, Lael Viana²; BUENO, Luis Guilherme Coelho³; UNGARETTI, Daniel⁴; SILVA, Guilherme Lima Ferreira da⁵; FRANCO, Tertuliano Franco Santos⁶; PAULA, João Pedro Cardoso de²

joaovictorpimenta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica - UNICAMP; ³Faculdade de Filosofia, Letras e Ciências Humanas - USP; ⁴Instituto de Matemática - UFRJ; ⁵Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP; ⁶Instituto de Matemática - UFBA

Intransitividade em um jogo de dados é um conceito muitas vezes pouco intuitivo. Afinal, se existem dados A, B, C tais que $A \triangleright B$ (melhor que) e $B \triangleright C$, é pouco natural imaginar que seja possível $C \triangleright A$. Fato é, escolhendo devidamente seus dados, esse fenômeno é possível e alguns resultados seguem desde que um bom modelo seja definido. No primeiro momento, exploraremos uma representação dos dados como palavras que nos possibilita definir a existência de conjuntos intransitivos para todas configurações de número de dados (m) e faces (n). Em um segundo momento, exploraremos um pouco a razão de conjuntos de dados ordenados intransitivos (\mathcal{I}) sobre o conjunto total de dados possível (\mathcal{D}). Analisando a assintótica em relação a n , simulamos o modelo e conjecturamos, levados por resultados computacionais e uma análise algébrica que $L = 3 \log 3$ em $|\mathcal{I}_n| = e^{nL(1+o(1))}$. Ainda mais, definida uma variável aleatória N_n^i que indica quantidade de vitórias de um dado sobre outro, mostraremos que o vetor de um jogo de três dados com as normalizadas $(\tilde{N}_n^{(AB)}, \tilde{N}_n^{(BC)}, \tilde{N}_n^{(CA)})$ converge, na assintótica em n , para um vetor $(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z})$ referente à um normal multivariada de matriz de covariância (Σ) singular e que $(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}) \in Im(\Sigma) = \{(x, y, z) | x + y + z = 0\}$ (1) nos indicando que a razão de conjuntos intransitivos de dados vai à zero.

Palavras-chave: Dados. Intransitividade. Teorema do Limite Central.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 RAO, C. R. **Linear statistical inference and its applications**. 2nd ed. New York: Wiley, 2002.

IC25

Desenvolvimento de nanopartículas de PLGA encapsuladas com bevacizumabe para terapia do carcinoma pulmonar

ZUCOLOTTO, Valtencir¹; SUZUKI, Isabella²; RODERO, Camila Fernanda¹; PEREIRA, Maria Vitória Silva¹

mariavitoriasp@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²University Southern of California - USC

O câncer de pulmão é uma neoplasia maligna de grande incidência e mortalidade, ocupando o segundo lugar entre os mais comuns no mundo. (1) O câncer de pulmão de células não pequenas (NSCLC) representa cerca de 85% dos casos registrados. (2) Embora grandes avanços no tratamento tenham sido alcançados, diversos fármacos utilizados ainda apresentam limitações quanto à durabilidade e entrega no local desejado, tornando necessária a busca de alternativas para aumento de sua eficiência. Uma das principais estratégias utilizadas para superar tais limitações é baseada no carregamento de compostos veiculados em nanocarreadores. O PLGA é um polímero biodegradável utilizado para o desenvolvimento e utilização de nanopartículas para entrega de fármacos. (3) O presente projeto tem como objetivo desenvolver e caracterizar as nanopartículas de PLGA encapsuladas com bevacizumabe (BVZ), um anticorpo monoclonal recombinante inibidor de fatores pró-angiogênicos, no tratamento do carcinoma pulmonar (NSCLC). Por meio do método de emulsão e evaporação de solvente, foram obtidas nanopartículas de PLGA encapsuladas com BVZ com tamanho de 171,40 nm, apresentando índice de polidispersão (PDI) de 0,14 e potencial zeta de -23,90 mV. Foram realizados ensaios de estabilidade durante 14 dias, espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) e caracterização da morfologia das nanopartículas por microscopia eletrônica de varredura (MEV). As formulações se mantiveram estáveis durante o período analisado. Os resultados de FTIR indicaram interações não-covalentes específicas entre a nanopartícula de PLGA e o anticorpo BVZ. A caracterização por MEV demonstrou que as formulações com e sem BVZ apresentaram características similares, com forma esférica e superfície lisa, sem formação de grandes aglomerados de nanopartículas. Os resultados até o momento são promissores e podem contribuir na pesquisa e estudos de tratamentos contra o câncer de pulmão.

Palavras-chave: Nanopartículas de PLGA. Bevacizumabe. Carcinoma pulmonar.

Agência de fomento: CNPq (126207/2022-4)

Referências:

1 SUNG, H. *et al.* Global Cancer Statistics 2020: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. **CA: a cancer journal for clinicians**, v. 71, n. 3, p. 209-249, 2021.

2 WANG, L. *et al.* Effect and biomarker of nivolumab for non-small-cell lung cancer. **Biomedicine and**

Pharmacotherapy, v. 117, p. 109199-1-109199-8, Sept. 2019.

3 DANHIER, F. *et al.* PLGA-based nanoparticles: an overview of biomedical applications. **Journal of Controlled Release**, v. 161, n. 2, p. 505-522, 2012.

IC26

Estudo das propriedades ópticas de estruturas plasmônicas usando simulação numérica

MAREGA JUNIOR, Euclides¹; MARCOS, Vinícius Bastos¹

viniciusbmarcos@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto apresentado tem como objetivo principal a realização de um estudo sistemático das propriedades ópticas de nanoestruturas metálicas compostas por fendas metálicas cujas dimensões laterais são menores que o comprimento de onda da radiação incidente. (1) Estas nanoestruturas são fabricadas num filme metálico depositado sob um substrato dielétrico. O estudo será feito através de simulações numéricas a partir do método de diferenças finitas no domínio temporal (FDTD). A partir do estudo serão determinadas propriedades tais como: i) espectro de transmissão óptica extraordinária; ii) espectro de reflectância e determinação de ressonâncias; iii) perfis do campo evanescente formado na interface dielétrico metal. (2) Tais estudos serão utilizados na fabricação de nanoestruturas para estudos da interação de plasmon-polaritons de superfícies com emissores quânticos.

Palavras-chave: Plasmônica. Nanoestrutura. SPP.

Agência de fomento: CNPq (117506/2022-2)

Referências:

- 1 SILVA, O. B. **Geração e propagação de ondas de superfície em fendas metálicas de dimensões menores que o comprimento de onda**. 2012. 148 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.
- 2 EBBESEN, T. W. *et al.* Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. **Nature**, v. 391, n. 6668, p. 667-669, 1998.

IC27

Estudo da terapia fotodinâmica antimicrobiana em modelo alveolar Transwell

KASSAB, Giulia¹; VICENTE, Maria Luiza Ferreira²; TOMÉ, Ana Júlia Barbosa²; KURACHI, Cristina²
anajuliabarbosatome@usp.br

¹University Health Network - UNH; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

A pneumonia, é uma doença infecciosa do trato respiratório inferior que acomete os alvéolos pulmonares, levando-os à superprodução de surfactante pulmonar, um fluido de extrema importância para a estabilidade dos sacos alveolares que ao reduzir a tensão superficial das paredes do alvéolo, impedindo-os de colabar (BROGDEN, 1991). (1) Os alvéolos são pequenas unidades no pulmão os quais promovem a troca gasosa entre o meio externo e a corrente sanguínea. Quando infectado por algum microrganismo, seja ele fungo, vírus ou bactéria, os alvéolos produzem este surfactante de maneira excessiva, fazendo com que a respiração torne-se difícil, levando ao paciente a ter falta de ar. O tratamento atual para este tipo de patologia consiste no uso de antibióticos, os quais, devido seu uso indiscriminado, vêm sendo ineficazes em vários casos. Nesse contexto, e tendo em vista a tendência de aumento de microrganismos resistentes a antibióticos nos próximos anos, vê-se a necessidade de uma terapia alternativa que consiga eliminar microrganismos, esquivando-se de seus mecanismos de resistência (KASHEV; HAMBLIN, 2017). (2) Este projeto visa analisar o efeito da terapia fotodinâmica antimicrobiana -a qual associa luz em um determinado comprimento de onda, oxigênio molecular e uma molécula sensível a luz- para realizar ensaios de cinética e inativação microbiana em um modelo alveolar. A partir de resultados anteriores publicados no Grupo de Óptica, observou-se que a presença do surfactante pulmonar impede a interação da molécula fotossensível com o microrganismo *Streptococcus pneumoniae*, impedindo sua inativação (KASSAB *et al.*, 2022). (3) Nesse sentido, visto que o azul de metileno foi um fotossensibilizador que se destacou ao interagir minimamente com o surfactante pulmonar, este será utilizado em todos os ensaios deste projeto. O modelo utilizado consiste no cultivo celular em co-cultura de duas diferentes linhagens celulares (epitélio e endotélio pulmonar) a fim de simular um alvéolo pulmonar. Primeiramente, foram realizados experimentos de inativação fotodinâmica para verificar se, no modelo alveolar, haveria redução na quantidade de unidades formadoras de colônia de *S. pneumoniae* em diferentes concentrações. Utilizando uma fluência de 20 J/cm², um tempo de incubação de 20 minutos, foi possível verificar que a concentração de 10 µM foi a mais efetiva nesses parâmetros. Em seguida, com o auxílio de um microscópio confocal de fluorescência, foram realizados experimentos de cinética do fotossensibilizador e da otimização dos marcadores fluorescentes celulares, a fim de verificar os melhores parâmetros de imageamento. A partir disso, a concentração de 5µM mostrou-se ser ideal para o imageamento das células. Utilizando essa mesma concentração, foram realizados experimentos de cinética da distribuição do azul de metileno nas células de endotélio e epitélio pulmonar, a fim de verificar a internalização dessa molécula em diferentes tempos de incubação.

Palavras-chave: Biofotônica. Microbiologia. Pulmonar.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

- 1 BROGDEN, K. A. Changes in pulmonary surfactant during bacterial pneumonia. **Antonie Van Leeuwenhoek**, v. 59, n. 4, p. 215-223, 1991.
- 2 KASHEV, N.; HAMBLIN, M. R. Can microbial cells develop resistance to oxidative stress in antimicrobial photodynamic inactivation? **Drug Resistance Updates**, v. 176, n. 5, p. 139-148, 2017.
- 3 KASSAB, G. *et al.* Lung surfactant negatively affects the photodynamic inactivation of bacteria – in vitro and molecular dynamic simulation analyses. **Biophysics and Computational Biology**, v. 119, n. 25, p. e2123564119-1-e2123564119-9, 2022.

IC28

Order-disorder effects and self-activated photoluminescence in hydroxyapatite nanoparticles via impurities incorporation

MAZUERA, Angélica Maria¹; PACÍFICO, Livia Gabrielle²; ZUCOLOTTI, Valtencir¹; VILELA, Raquel Riciati do Couto¹; MACHADO, Thales Rafael¹

livia.pacifico@estudante.ufscar.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Hydroxyapatite (HA) is a widely studied material in biomedical areas, due to its properties such as high biocompatibility, bioactivity and controlled biodegradability. (1) In nanomedicine, HA nanoparticles (NPs) have been explored as important tools for the image diagnosis and therapy of diseases such as cancer. (2) Specifically, the diagnostic function of HA NPs can be improved via the inclusion of structural defects during the synthesis or subsequent heat treatment. (3) This study aims to demonstrate the influence of carbon-associated defects on the self-activated photoluminescence of HA. The NPs were synthesized by a simple chemical precipitation followed by heat treatment at 400°C/4h. The long- and short-range order of as-synthesized and heat-treated samples were characterized, evidencing an increase in lattice disorder as a function of impurities concentrations. The Fourier transform infrared (FTIR) spectra were used to estimate the concentrations of the impurities, confirming their incorporation (0.6 wt.% to 10.8 wt.%) and partial elimination after the heat treatment. Thermogravimetric analysis (TGA) evidenced that the main mass loss in the temperature range studied is related to structural water elimination and partial elimination of introduced impurities. Transmission electron microscopy (TEM) analysis revealed that the samples comprise of nanorods with sizes below 40 nm. PL spectroscopy revealed that degree of incorporation of impurities affected the intensity, position, and broadness of the defect-related broadband emission when excited at 405 nm, confirming their impact on PL properties of HA NPs. **Acknowledgments:** Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), grants nº 2022/14435-8, 2020/14417-4, and CNPq, grant nº 164373/2020-9

Palavras-chave: Bioimaging. Hydroxyapatite. Nanomedicine.

Agência de fomento: FAPESP (2022/14435-8)

Referências:

- 1 QI, C. *et al.* Calcium-based biomaterials for diagnosis, treatment, and theranostics. **Chemical Society Reviews**, v. 47, n. 2, p. 357-403, 2018.
- 2 MACHADO, T. R. *et al.* Advances in the synthesis and applications of self-activated fluorescent nano- and micro-hydroxyapatite. In: TAFT, C. A. (ed.). **Research topics in bioactivity, environment and energy**. New York: Springer, Cham, 2022.
- 3 MACHADO, T. R. *et al.* Designing biocompatible and multicolor fluorescent hydroxyapatite nanoparticles for cell-imaging applications. **Materials Today Chemistry**, v. 14, p. 100211, Dec.

2019.

IC29

Novas quimioterapias citotóxicas para o câncer de mama metastático

AFONSO, Maynara¹; SOUZA, Matheus da Silva¹; RAFAEL, Larissa Daniela Dias²; MASS, Eduardo Bustos³; RUSSOWSKY, Dennis⁴; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

maynara.afonso@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Química de São Carlos - USP; ³Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS; ⁴Departamento de Química Orgânica - UFRGS

O câncer de mama (CM) pode ser caracterizado por proliferação anormal de forma desordenada e rápida das células do tecido mamário. Dentre as mulheres, o câncer de mama é o mais comumente diagnosticado e a principal causa de mortalidade devido à doença. (1) Em meio a diferentes tipos e subtipos de câncer de mama encontra-se o câncer de mama triplo negativo (CMTN), que é responsável por cerca de 10 a 15% de todos os casos de CM. Aproximadamente 20% dos casos de CMTN são ocasionados pela linhagem tumoral agressiva e silenciosa MDA-MB-231, a qual está associada a opções terapêuticas e prognósticos desfavoráveis. (2) A terapia citotóxica com alvos comuns entre células saudáveis e tumorais revelou-se como uma abordagem terapêutica bastante promissora. Entretanto, ainda se torna evidente a necessidade de se buscar moléculas capazes de modular tais alvos de forma eficiente e com pronunciada seletividade. Neste contexto, o presente projeto objetiva conduzir triagens biológicas de compostos bioativos planejados para atuar sobre a proteína tubulina, alvo molecular validado que afeta a capacidade de polimerização dos microtúbulos e inviabiliza seletivamente a proliferação de células de CMTN da linhagem MDA-MB-231. Para isso, compostos sintéticos híbridos de quinazolina-chalconas previamente selecionados em ensaios de citotoxicidade *in vitro* com índice de seletividade (IS) maior que 9 em relação a fibroblastos humanos saudáveis HFF-1 (AQC-02 e AQC-06) foram submetidos a ensaios de migração *wound healing*. Os resultados apontaram perfil de seletividade citotóxica promissor, acumulando evidências que apoiam a continuação da investigação e caracterização das 2 moléculas em ensaios de modulação da polimerização da tubulina e de competitividade pelo sítio da colchicina. Os resultados dos ensaios de polimerização da tubulina demonstram que os compostos apresentam atividade inibitória, com valores de Concentração Inibitória (CI₅₀) de 5,71 μ M e 3,17 μ M, respectivamente, o que sugere que o seu potencial de interferir na formação e estabilização dos microtúbulos. (3) O ensaio de competitividade pelo sítio da colchicina buscou avaliar a capacidade dos compostos em competir com a colchicina pelo sítio de ligação da tubulina. A colchicina é conhecida por se ligar a um sítio específico na tubulina, inibindo a polimerização dos microtúbulos. Com base nos resultados obtidos, é possível afirmar que os compostos reduzem a fluorescência intrínseca da colchicina, indicando uma interação com o sítio de ligação da colchicina na proteína. Portanto, os compostos foram capazes de modular a tubulina *in vitro*, sendo responsáveis pela inibição da sua polimerização em microtúbulos. A partir dos ensaios complementares de mecanismo de ação, estima-se que a inibição tem, possivelmente, relação com a interação dos compostos no sítio de ligação da colchicina. Nesse contexto, estes inibidores de polimerização da tubulina apresentam características promissoras e serão otimizados quanto a diversos parâmetros críticos para a obtenção de novos candidatos a fármacos para a terapia do CMTN.

Palavras-chave: Câncer de mama. Tubulina. Química medicinal.

Agência de fomento: CNPq (138066/2022-1)

Referências:

- 1 SUNG, H. *et al.* Global cancer statistics 2020: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. **CA: a cancer journal for clinicians**, v. 71, n. 3, p. 209-249, May/June 2021.
- 2 SINGHAL, J. *et al.* Metastasis of breast tumor cells to brain is suppressed by targeting RLIP alone and in combination with 2'-hydroxyflavanone. **Cancer Letters**, v. 438, p. 144-153, Dec. 2018.
- 3 ČERMÁK, V. *et al.* Microtubule-targeting agents and their impact on cancer treatment. **European Journal of Cell Biology**, v. 99, n. 4, p. 151075-1-151075-14, May/June 2020.

IC30

Quantificação de espécies reativas de oxigênio produzidas por moléculas orgânicas em reações sonodinâmicas

OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de¹; PRATAVIEIRA, Sebastião¹; AYALA, Erika Toneth Ponce¹; SOUZA, Murilo de Oliveira¹

murilodeoliveira8@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A terapia sonodinâmica (TSD) é uma modalidade terapêutica anticâncer muito promissora baseada na interação do ultrassom de baixa intensidade, uma molécula sonoativa chamada de sonossensibilizador (SS) e o oxigênio molecular presente no tecido. (1) O ultrassom é uma onda mecânica com excelente capacidade de penetrar nos tecidos biológicos, portanto, é capaz de ativar o SS em locais mais profundos e induzir dano celular por meio da geração de espécies reativas de oxigênio (ROS). Portanto, a importância de quantificar as substâncias reativas liberadas durante a TSD é relevante, tanto para fins de dosimetria quanto para melhorar a compreensão dos mecanismos de ação envolvidos nos efeitos citotóxicos da TSD. (2) Com a finalidade de entender melhor a interação entre o ultrassom e o SS, que leva à com a geração de oxigênio singleto (1O_2), um tipo de ROS altamente citotóxico, estudos de espectroscopia de ressonância paramagnética (EPR) combinado com a leitura das mudanças nas propriedades ópticas das moléculas foram abordados no presente trabalho. Para os estudos de espectroscopia UV-Vis, o 1,3-difenilisobenzofurano (DPBF) foi utilizado como sensor químico de oxigênio singleto. Para a análise de EPR, devido ao tempo de vida baixo do 1O_2 , utilizou-se um spin-trap, 2,2,6,6-Tetramethyl-4-piperidino (TEMP) para estabilizá-lo. Os SS's estudados foram: Protoporfirina IX, Curcumina, Azul de Metileno, Indocianina Verde e Clorina e6. Sendo todos os produtos utilizados adquiridos da Sigma Aldrich-USA. Com soluções preparadas utilizando o DPBF e o TEMP, separadamente, os SS's foram irradiados com ultrassom utilizando o aparelho SONOPULSE III (Ibramed, Brasil), e em seguida as leituras de absorção e EPR foram coletadas. De acordo com os espectros de absorção das soluções (SS [1uM]+DPBF [30uM]), notou-se uma queda na absorbância em 407 nm aproximadamente, indicando geração de 1O_2 durante a irradiação com o ultrassom. A constante de decaimento das soluções para cada SS, foi possível determinar que a geração de 1O_2 usando Protoporfirina IX foi a maior; em relação às leituras de EPR, avaliando as intensidades pico-a-pico dos sinais gerados pela ligação do TEMP com a ROS, pode-se notar que a geração de 1O_2 é maior para Indocianina Verde. Com os resultados obtidos, observou-se que os SS's que mais apresentaram formação de 1O_2 foram a Protoporfirina IX, o Azul de Metileno e a Indocianina Verde, entretanto, como explicitado por Buhong Li, existe uma divergência na sensibilidade de cada técnica espectroscópica, em vista disso, são necessários mais estudos submetendo os SS's a diferentes protocolos, com o objetivo de complementar os resultados obtidos. (3)

Palavras-chave: Sonodinâmica. Espectroscopia. Ultrassom.

Agência de fomento: CNPq (126231/2022-2)

Referências:

- 1 ROSENTHAL, I.; SOSTARIC, J. Z.; RIESZ, P. Sonodynamic therapy: a review of the synergistic effects of drugs and ultrasound. **Ultrasonics Sonochemistry**, v. 11, n. 6, p. 349-363, 2004. DOI: 10.1016/j.ultsonch.2004.03.004.
- 2 RENSCHLER, M. F. The emerging role of reactive oxygen species in cancer therapy. **European Journal of Cancer**, v. 40, n. 13, p. 1934-1940, 2004. DOI: 10.1016/j.ejca.2004.02.031
- 3 BUHONG, L. *et al.* Singlet oxygen detection during photosensitization. **Journal of Innovative Optical Health Sciences**, v. 6, n. 1, p. 1330002-1-1330002-9, 2013.

IC31

Caracterização morfológica de esferóides derivados de linhagem celular de hepatocarcinoma humano

MIRANDA, Renata Rank¹; LEITE, Celisnolia Moraes²; ZUCOLOTTO, Valtencir¹; BARRIOS, Nathália Liz²

nathalia1b@estudante.ufscar.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

O cultivo celular 3D é caracterizado por um crescimento celular tridimensional no qual as células regulam sua morfologia e fisiologia, tornando-se um sistema integrado e mais representativo do que ocorre in vitro, permitindo a possibilidade de mimetizar o microambiente tecidual encontrado in vivo. (1) Buscamos neste estudo o estabelecimento de um protocolo para obtenção dos esferóides a partir da linhagem de hepatocarcinoma humano, HepG2, que possui pré-disposição para a formação natural dos esferóides. Para obtenção dos esferóides empregamos a metodologia de suspensão forçada na qual utilizamos uma placa de 96 poços com formato em "U", analisando a formação das estruturas nos dias 3, 5 e 7, em três diferentes concentrações de suspensões celulares. Em todas as condições avaliadas, os esferóides apresentaram diâmetro médio que variaram de 282-376 μm . A viabilidade das células presentes nos esferóides foi confirmada pelo ensaio da integridade de membrana por azul de tripano apresentando valores que variaram de 25 a 79%. Todos os esferóides apresentaram formato arredondado, com boa compactação e região necrótica visível a partir do quinto dia de idade. Outros experimentos estão em andamento para mais análises quanto à morfologia, viabilidade e medidas dimensionais dos esferóides, além de análises microscópicas de campo claro, confocal e de varredura que serão realizadas para melhor estabelecimento e padronização de um modelo de cultura 3D para estudo in vitro da eficácia de nanocarreadores de fármacos.

Palavras-chave: Esferóides. Cultivo celular 3D. Crescimento celular tridimensional.

Agência de fomento: CNPq (138072/2022-1)

Referências:

1 BIAŁKOWSKA, K. *et al.* Spheroids as a type of three-dimensional cell cultures: examples of methods of preparation and the most important application. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 21, n. 17, p. 6225-1-6225-17, 2020. DOI: 10.3390/ijms21176225.

IC32

Avaliação das componentes de perfusão e difusão obtidas com a técnica de Ressonância Magnética IVIM

SOLCIA, Gustavo¹; PAIVA, Fernando Fernandes¹; SENA, Rodrigo¹

rodrigosena@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Ressonância Magnética (RM) é uma técnica não invasiva de diagnóstico por imagem amplamente usada em aplicações clínicas. Na década de 80 foi proposto o método de Movimento Incoerente Intravoxel (do inglês, IVIM) que ficou conhecido pela sua capacidade de separar os efeitos da microcirculação e da difusão térmica in vivo com grande potencial clínico no diagnóstico e acompanhamento de doenças. (1-2) A técnica se baseia numa composição de exponenciais que carregam coeficientes que representam a difusão e a perfusão, sendo D e D^* parâmetros referente a difusão pura no espaço e a pseudo-difusão, respectivamente, enquanto f se refere a fração de perfusão do tecido. O propósito deste trabalho é analisar a variabilidade de dados de difusão e da perfusão ao longo de regiões de interesse e investigar variações entre sujeitos. Para isso, implementamos um código em python com uma modelagem biexponencial para a quantificação de f , D e D^* . O fitting feito foi segmentado em 2, sendo uma regressão linear para valor de fator de ponderação de difusão, valor b , menores que 200 s/mm^2 e a regressão com a biexponencial propriamente dita para valores b maiores que 200 s/mm^2 . Pela regressão linear foi determinado o D , enquanto os outros coeficientes foram determinados pela segunda regressão. As imagens usadas para determinação dos parâmetros foram de cérebro e de rim, sendo que foi observado uma grande variação nos valores dos coeficientes de difusão e perfusão dentro de um mesmo tecido na imagem de cérebro, o mesmo não foi observado no rim. Uma possível explicação para isso se deve ao fato de os valores b presentes nas imagens de cérebro estarem em pequena quantidade e mal distribuídos, visto que a sensibilidade do método a uma determinada fonte de sinal depende do fator de ponderação da difusão.

Palavras-chave: Ressonância. Neurociência. IVIM.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

- 1 BIHAN, D. *et al.* Separation of diffusion and perfusion in intravoxel incoherent motion MR imaging. **Radiology**, v. 168, n. 2, p. 497-505, 1988.
- 2 FEDERAU, C. Intravoxel incoherent motion MRI as a means to measure in vivo perfusion: a review of the evidence. **NMR in Biomedicine**, v. 30, n. 11, e3780, Nov. 2017. DOI: 10.1002/nbm.3780

IC33

 ^{13}C Solid-State NMR associated with multivariate analysis to study degradation of natural organic matter

AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de¹; GARCIA, Rodrigo Henrique dos Santos¹; BARCOTO, Mariana de Oliveira²; SOARES, João Gabriel da Silva¹; RODRIGUES, André²

joaosilsoares@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Biociências - UNESP

The identification of the organic components involved in the degradation of natural organic matter is crucial for understanding degradation mechanisms. Solid-state ^{13}C nuclear magnetic resonance spectroscopy (ssNMR) has been widely used for analyzing organic compounds, including those related to environmental sensitive systems. However, interpreting ^{13}C NMR spectra can be challenging due to sample complexity, with strong line superposition being a common problem. Thus, the use of multivariate analysis has become almost mandatory, not only to identify organic components, but also to separate samples according to their composition, origin or other physical chemical properties. Recently, an approach that combines pulse sequence induced T_1 spectral modulation with spectral separation based on Multivariate Curve Resolution (PSIM-MCR) was successfully applied to help elucidating the composition of pretreated sugarcane bagasse (1) and constructing polymers. (2) The approach explores the sensitivity of solid state NMR to spin interaction and relaxation times, so, in principle, different type of spectral modulation provide by a specific pulse sequences can also be used. In this presentation an analysis of the spectral separation capability of MCR will be discussed based on the degree of line superposition, line width and signal to noise ratio. The possible extension of the PSIM-MCR approach to decompose solid-state ^{13}C NMR spectra based on properties such C-H coupling, chemical shift anisotropy, $T_{1\rho}$ relaxation times is also considered. The approaches are tested in model samples, such semicrystalline polymer, micro crystalline cellulose and applied to assist the interpretation of solid-state ^{13}C NMR spectra used for characterizing the degradation of organic matter in colonies of fungus growing ants.

Palavras-chave: ^{13}C NMR. Multivariate statistics. Organic matter.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 ESPÍRITO SANTO, M. C. *et al.* When the order matters: impacts of lignin removal and xylan conformation on the physical structure and enzymatic hydrolysis of sugarcane bagasse. **Industrial Crops and Products**, v. 180, p. 114708-1-114708-12, June 2022.
- 2 NOVOTNY, E. H.; GARCIA, R. H. S.; AZEVEDO, E. R. Pulse sequence induced variability combined with multivariate analysis as a potential tool for ^{13}C solid-state NMR signals separation, quantification, and classification. **Journal of Magnetic Resonance Open**, v. 14-15, p. 100089-1-100089-9, June 2023.

IC34

3D printing and characterization of an alginate-gelatin hydrogel soaked in low molecular weight chitosan for application in burns treatment

CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹; TENDULINI, Ana Julia Gonzalez ¹

anajulia.gonzalez@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Burns are among the skin lesions that cause the most morbidity and weakness, leaving psychological, physical, and aesthetic sequelae. (1) They directly influence the quality of life of individuals affected by serious accidents, especially in emerging countries where awareness and information provided by public policies are limited, in addition to having a smaller structure for treatment. The use of dressings as a complementary treatment subsidizes the main treatments and has great potential in preventing complications in cases where burns profoundly affect a large-medium extension of the body. With the advancement of technology and the availability of materials, 3D printing has become a large-scale manufacturing process with great potential. It allows for the geometric, physical, and chemical modulation of materials of interest, particularly printed hydrogels that emerge as potential therapeutic products. (1-2) These products can be printed together with cell lines or printed as scaffolds for grafting on injured sites. The present project aims to synthesize, 3D print, and characterize gelatin-alginate formulations. (3) These formulations are subsequently soaked in low molecular weight chitosan and calcium chloride to construct the base of a 3D printed delivery system for application in the complementary treatment of burns. (1) Modifications were made to the printer's hardware to obtain temperature control that favors working with gelatin. The system achieved temperatures that oscillated in the range of 8-10 degrees Celsius, which was considered very satisfactory. By using 3D modeling software and notepads, it was possible to design and modulate parameters that control the deposition of filaments for different proportions of the hydrogel formulation. T-tests were carried out throughout the project to evaluate and optimize the formulations made. The tests demonstrated the ineffectiveness of pre-crosslinking when mixing alginate and gelatin. However, they also showed some conditions of interest for further characterizations with non-pre-crosslinked formulations that will be used again in more detailed tests with new proposals for formulations.

Palavras-chave: Custom delivery systems in 3D bio-printing. Alginate-gelatin printed grafts. Burns treatment.

Agência de fomento: CNPq (2022-1964)

Referências:

1 LIN, H.-Y.; CHANG, T.-W.; PENG, T.-K. Three-dimensional plotted alginate fibers embedded with diclofenac and bone cells coated with chitosan for bone regeneration during inflammation. **Journal of Biomedical Materials Research A**, v. 106, n. 6, p. 1511-1521, June 2018.

2 DHALIWAL, K.; LOPEZ, N. Hydrogel dressings and their application in burn wound care. **British Journal of Community Nursing**, v. 23, n. Sup9, p. S24-S27, 2018.

3 DI GIUSEPPE, M. *et al.*. Mechanical behaviour of alginate-gelatin hydrogels for 3D bioprinting. **Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials**, v. 79, p. 150-157, Mar. 2018.

IC35

Probing mobility constrains in polymers using ^1H double quantum time domain NMR as a method to investigate thermal, chemical or environmental degradation effects

LIMA, Aline Pinde¹; CHAVES, Erica Gervasoni¹; HONORATO, Hercílio de Angeli¹; SILVA, Antonio Henrique Monteiro da Fonseca Thome da¹; TEIXEIRA, Sylvia Correa dos Santos¹; GARCIA, Rodrigo Henrique²; MENEZES, Sonia Maria Cabral de²; OLIVEIRA, João Eduardo de²; LAZARI, Marina Perassoli de²; AZEVÊDO, Eduardo Ribeiro de²

jh78167816@usp.br

¹Centro de Pesquisas, Desenvolvimento e Inovação Leopoldo Américo Miguez de Mello - PETROBRAS;

²Instituto de Física de São Carlos - USP

We will discuss the application of ^1H double quantum time domain NMR (^1H DQTDNMR) to probe distribution of mobility constraints resulting from degradation of polymers. ^1H DQTDNMR allows detecting the build-up of double quantum coherences, which can be associated to the density of points with some movement restriction in the sample. Applying this technic at temperatures where a solid phase is absent, the double quantum coherences can be associated to chain crosslinking or entanglement. (1) We will discuss the most common processing procedures, the limitations and advantages of the method considering the different polymer systems, for example elastomers, polymer melts and polymer composites. Finally, we will show examples on how this type of method can help to characterize the degradation process in constructing polymer such as polyamides. Acknowledgements: PETROBRAS, CNPQ (grant 308760/2022-0) and FAPESP.

Palavras-chave: Double quantum. Polymer. Crosslinks.

Agência de fomento: PUB-USP (Não se aplica)

Referências:

1 MUNARO, A. P. *et al.* Ageing and structural changes in PDMS rubber investigated by time domain NMR. **Polymer Degradation and Stability**, v. 166, p. 300-306, Aug. 2019. DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2019.06.008.

IC36

Interação de agentes antimicrobianos com modelos de membrana celular investigada através de espectroscopia vibracional e microscopia

BICEGO, João Romero Pádua¹; MIRANDA, Paulo Barbeitas¹

joaoromero1@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A descoberta de novos antibióticos avança lentamente e a resistência adquirida pelos microorganismos tem se tornado um problema crítico na área da saúde. Neste contexto, peptídeos antimicrobianos (AMPs – do inglês antimicrobial peptides) têm sido investigados como potenciais agentes antimicrobianos de amplo espectro. O presente trabalho, tem como objetivo investigar a interação de (AMPs) com modelos de membrana celular que mimetizam, mesmo de que de maneira simplificada, membranas biológicas de mamíferos e de bactérias. O modelo mimético utilizado foi o de filmes de Langmuir, que consiste no espalhamento de fosfolípidos sobre uma subfase aquosa, formando assim uma mono camada lipídica na superfície, imitando de maneira simplificada metade da membrana celular. Os lipídios utilizados nos modelos foram, o DPPG (1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phospho-rac-(1-glycerol)) para simular a membranas bacterianas, e DPPC (1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phospho-rac-(1-glycerol)) para simular membranas de mamíferos, foram espalhados sobre a subfase de tampão fosfato salino (PBS) simulando o meio extracelular. (1) Os peptídeos antimicrobianos (AMP0 e AMP170) foram sintetizados a partir do veneno da tarântula colombiana *P. verdolaga*. Finalmente, para investigar dos efeitos dos AMPs nos filmes de Langmuir foram utilizados de 3 métodos: compressão/expansão isotérmica dos filmes de Langmuir após a injeção dos AMPs na subfase; microscopia a ângulo de Brewster (BAM) para verificar possíveis inhomogeneidades no filme; a espectroscopia vibracional por geração de soma de frequências (SFG), que é sensível a conformação das cadeias apolares dos lipídios. (2) Os resultados mostram que estes AMPs causam uma notável perturbação nas membranas aniônicas de DPPG (bacterianas), enquanto as membranas zwitteriônicas de DPPC (mamíferos) são bem menos afetadas pelos mesmos. Isso demonstra seus potenciais como agentes antimicrobianos, com pouca propensão a serem tóxicos para mamíferos.

Palavras-chave: Filmes de Langmuir. Espectroscopia de soma de frequências(SFG). Peptídeos antimicrobianos (AMPs).

Agência de fomento: CNPq (2022-2101)

Referências:

1 RIMOLI, C. V. **Mecanismos de interação molecular de polieletrólitos antimicrobianos em membranas modelo por espectroscopia vibracional não linear**. 2015. 153 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015. DOI: 10.11606/D.76.2015.tde-06102015-083354.

2 VOLPATI, D. *et al.* Vibrational spectroscopy for probing molecular-level interactions in organic films mimicking biointerfaces. **Advances in Colloid and Interface Science**, v. 207, p. 199-215, May 2014.

IC37

Informação Quântica Via Ressonância Magnética Nuclear

LOURENÇO, Ygor de Castro¹; FERREIRA, Arthur Gustavo de Araújo¹

ygorcl@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho demonstra a montagem de um sistema de Computação Quântica (CQ) baseado em Ressonância Magnética Nuclear (RMN). O meio físico utilizado consiste em um cristal líquido no qual o núcleo de interesse possui spin maior que $1/2$. Esses núcleos são chamados quadrupolares por possuírem um momento de quadrupolo elétrico, o qual pode interagir com o gradiente de campo elétrico presente no cristal líquido. No caso de um núcleo com spin $3/2$ (Na), essa interação é descrita em uma base que representa um sistema de 2 q-bits. A amostra é colocada em um campo magnético de 9.4T e através do uso de pulsos de radiofrequência (RF), podemos manipular o estado quântico do sistema e produzir os estados da base computacional. Os pulsos de RF agem como operações unitárias que são usadas para produzir portas lógicas e algoritmos quânticos. (1) Esses pulsos são modulados em amplitude e fase porém seguindo sempre uma função geradora que garante sua suavidade. Isso significa que não haverá mudanças bruscas de amplitude ou fase ao longo da aplicação das sequências. (2) Ao final de uma sequência de operações, o estado quântico do sistema pode ser completamente mapeado utilizando o processo chamado de tomografia do estado quântico, que reconstrói a matriz densidade completa desse sistema de spin nuclear. Com isso, pretendemos reproduzir dois algoritmos quânticos: o Algoritmo de Deutsch, que consiste em determinar se uma função é constante ou balanceada; e o Algoritmo de busca de Grover, que realiza buscas em uma lista desordenada. Também pretende-se testar um método novo para a tomografia do estado quântico, com uma seleção de coerências mais eficiente e potencial para acelerar este processo.

Palavras-chave: Computação quântica. Ressonância magnética nuclear. Informação quântica.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

- 1 FORTUNATO, E. M. *et al.* Design of strongly modulating pulses to implement precise effective Hamiltonians for quantum information processing. **Journal of Chemical Physics**, v. 116, n. 17, p. 7599-7606, 2002.
- 2 ARAÚJO-FERREIRA, A. G. **Aplicação do formalismo de dois modos de um condensado de Bose-Einstein em um sistema de ressonância magnética nuclear**. 2014. 95 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

IC38

Caracterização estrutural das diferentes isoformas da pulchellina

MÜNDEL, Vinícius¹; MUNIZ, Joao¹

vinimundel@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Esta pesquisa visa estudar as isoformas da proteína pulchellina presentes nas sementes da planta trepadeira brasileira *Abrus pulchellus*. As isoformas da pulchellina pertencem à família de Proteínas Inibidoras de Ribossomo (RIP) tipo 2 que inclui toxinas conhecidas, como abrina e ricina, devido às suas poderosas propriedades tóxicas. Com uma atividade semelhante às outras RIPs, as isoformas da pulchellina consistem em uma cadeia lectínica (cadeia B) que se liga a carboidratos, facilitando a entrada nas células, e uma cadeia RNA n-glicosidase (cadeia A) que inativa a síntese proteica por meio da depurinação do RNA ribossômico. (1) O objetivo deste estudo é demonstrar as particularidades das isoformas da pulchellina e sua relação com outras RIPs. Para alcançar esse objetivo, é realizado o processo de extração e purificação das toxinas a partir das sementes de *Abrus pulchellus*. Em seguida, as isoformas são separadas e cristalizadas, permitindo a obtenção de suas estruturas cristalinas. A fim de investigar propriedades da proteína, experimentos são conduzidos utilizando diferentes ligantes, como a N-acetilgalactosamina (GalNAc), que tem se mostrado eficaz em estudos anteriores envolvendo essa família de proteínas. Além disso, testes biofísicos são realizados no intuito de determinar propriedades das isoformas da pulchellina. A importância do estudo se mostra no potencial uso de plantas na medicina e toxicologia. O *Abrus pulchellus*, sendo uma planta nativa do Brasil, possui sementes que contêm proteínas altamente tóxicas, similarmente encontradas em outras plantas como *Ricinus communis* (mamona) e *Abrus precatorius* (ervilha do rosário). Essas proteínas são classificadas como RIPs e são capazes de interromper a produção de proteínas nas células, mesmo em doses mínimas. A compreensão das isoformas da pulchellina e sua relação com outras RIPs é de extrema importância para o avanço da pesquisa nessa área. Ao estudar as isoformas em nível estrutural e suas interações com diferentes ligantes, é possível compreender as variações na cadeia lectínica e seu impacto na citotoxicidade da proteína. Ainda mais, esses estudos fornecem informações valiosas que podem contribuir para o desenvolvimento de aplicações terapêuticas e avanços em pesquisas existentes. Os experimentos realizados envolveram a extração, purificação e cristalização das isoformas da pulchellina, seguidas pela determinação de suas estruturas por meio da difração de raios-X. Ademais, foram conduzidos experimentos de ligação com diferentes açúcares para investigar os sítios de ligação e as variações conformacionais entre as isoformas. Testes biofísicos, como SEC-MALS e DSF, serão realizados para obter informações sobre o peso molecular, tamanho, estado oligomérico e estabilidade térmica das proteínas, tanto isoladamente quanto em complexo com ligantes. Em resumo, este estudo contribui para a compreensão das isoformas da proteína pulchellina e sua relação com outras RIPs. Os resultados obtidos podem fornecer informações valiosas para aplicações terapêuticas das RIPs atuais e futuras.

Palavras-chave: Cristalografia. Proteínas inibidoras de Ribossomo. Pulchellina

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 STIRPE, F. Ribosome-inactivating proteins: from toxins to useful proteins. **Toxicon**, v.67, p. 12-16, June 2013. DOI: 10.1016/j.toxicon.2013.02.005.

IC39

Mistura de superfluidos atômicos e aprisionamento em vórtices

SANTARELLI, Mônica Andrioli Caracanhas¹; NEVES, Joel Bacellar¹

joelneves@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho busca-se explorar a interação entre dois condensados de Bose-Einstein espacialmente sobrepostos de espécies atômicas distintas, considerando um regime limite de grande desbalanço entre o número de átomos de cada espécie, no qual a majoritária está em estado de vórtice. Neste contexto, a "*equação de Gross-Pitaevskii acoplada (1)*".que rege o sistema apresenta solução analítica, na qual a função de onda da espécie majoritária age como um pseudo-potencial para a minoritária, aprisionando-a no núcleo do seu vórtice. Após o estudo das soluções e determinação das funções de onda de cada espécie, foi feita uma análise termodinâmica completa sobre a condensação da espécie minoritária aprisionada, partindo do cálculo da sua densidade de estados e temperatura crítica de condensação.

Palavras-chave: Física teórica. Condensado de Bose-Einstein. Aprisionamento em vórtice.

Agência de fomento: CNPq (167585/2022-3)

Referências:

1 PETHICK, C.; SMITH, H. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.

IC40

Incorporação do Gálio em vidros bioativos: novas relações estruturais/funções descobertas por técnicas de RMN de estado sólido

GOMES, Yara Hellen Firmo¹; ECKERT, Hellmut¹

yaragomes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a publicação pioneira reportando a habilidade de certos vidros no diagrama de composição $SiO_2 - CaO - Na_2O - P_2O_5$ para juntar material ósseo sem formar tecido fibroso ao redor deles ou promover inflação ou toxicidade (1), pesquisa e desenvolvimento de vitrocerâmicas e vidros bioativos promoveram melhora da qualidade de vida. Dependendo da aplicação pretendida, aditivos podem ser incorporados para melhor performance. O gálio, em particular, se destaca por seu potencial antibacteriano, atribuído à semelhança entre seus íons Ga^{3+} e íons Fe^{3+} . (2) No entanto, há uma compreensão limitada de como a incorporação estrutural do gálio nesses vidros está relacionada às suas propriedades bioativas. Para abordar este assunto, a espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) fornece uma abordagem quantitativa e flexível, oferecendo insights sobre as funções estruturais dos elementos introduzidos na rede vítrea. Este estudo concentra-se no uso de técnicas de RMN para investigar vidros bioativos dopados com gálio produzidos por processos de fusão/resfriamento e sol-gel, com composições $[(49, 16 - x)SiO_2 - (23, 33)Na_2O - (25, 79)CaO - (1, 72)P_2O_5 - (x)Ga_2O_3]$ e $[(80 - x)SiO_2 - (15)CaO - (5)P_2O_5 - (x)Ga_2O_3]$, respectivamente. As amostras foram submetidas a estudos de RMN para os núcleos de ^{29}Si , ^{31}P , ^{23}Na e ^{71}Ga , que revelam a formação de ligações Ga-O-Si em ambas as composições. Observou-se também que o gálio é majoritariamente encontrado no número de coordenação 4, indicando seu papel como formador de rede. No caso das amostras derivadas de fusão, os resultados de ^{31}P indicam um efeito de proximidade entre átomos de P e Ga. Quanto às amostras obtidas por sol-gel, os espectros de ^{29}Si e ^{31}P indicam que a formação de ligações Ga-O-Si atinge um limite, levando à formação de ligações Ga-O-P com o aumento do teor de gálio. Pesquisas adicionais estão sendo conduzidas para explorar a estrutura dada a cristalização parcial das amostras derivadas de fusão, permitindo a comparação das propriedades bioativas entre essas vitrocerâmicas e as duas composições/técnicas mencionadas anteriormente, através de medidas de cinética de dissolução.

Palavras-chave: Vidros bioativos. Ressonância magnética nuclear. Estado sólido.

Agência de fomento: FAPESP (2021/08871-7)

Referências:

- 1 HENCH, L. L.; POLAK J. M. Third-generation biomedical materials. **Science**, v. 295, n. 5557, p. 1014-1017, 2002. DOI: 10.1126/science.1067404.
- 2 KURTULDU, F. *et al.* Gallium containing bioactive materials: a review of anticancer,

antibacterial, and osteogenic properties. **Bioactive Materials**, v. 17, p. 125-146, 2022. DOI: 10.1016/j.bioactmat.2021.12.034.

PG1

Development of low energy and high repetition rate femtosecond laser

PINTO, Vinícius Pereira¹; NOGUEIRA, Giovana Trevisan²; YASUOKA, Fatima Maria Mitsue¹; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹

viniciuspinto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

The Ti:Sapphire femtosecond laser is a ultra-short pulse solid-state laser developed by Moulton (1986). It is characterized by having a sapphire crystal doped with titanium ions, that has a four-level structure, as a gain medium. The crystal enables the Kerr Lens Mode-locking method, since it has third-order nonlinear optical properties that produces the self-focusing effect at high intensities. The operability of the ultrashort pulse laser requires complete stability of the optical cavity to achieve the mode-locking regime. (1) The cavity has a ring format, which is of the bow tie type, whose configuration is appropriate for the generation of ultrashort pulses in the 800nm range with a temporal duration of the order of tens of femtoseconds and a high repetition rate of 1 GHz. (2) This model allows adaptation to a laser scanning system with high numerical aperture (NA) focusing optics, which can be applied in biological tissue ablation studies, such as the cornea. The advantage of the low-energy and high-repetition rate femtosecond laser is that tissue can be teared with thin, highly localized cuts without collateral damage, producing cavitation bubbles with diameters of a few micrometers, using a compact, versatile, and high-precision mounting. (3)

Palavras-chave: Femtossecond laser. High repetition rate. Compact cavity. Low energy.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 NOGUEIRA, G. T.; CRUZ, F. C. Efficient 1 GHz Ti:Sapphire laser with improved broadband continuum in the infrared. **Optics Letters**, v. 31, n. 13, p. 2069-2071, 2006.
- 2 YEFET, S.; PE'ER, A. A review of cavity design for Kerr lens mode-locked solid-state lasers. **Applied Sciences**, v. 3, n. 4, p. 694-724, 2013.
- 3 EHLERS, A. *et al.* High (1GHz) repetition rate compact femtosecond laser: a powerful multiphoton tool for nanomedicine and nanobiotechnology. **Journal of Applied Physics**, v. 102, n. 1, p. 014701, 2007.

PG2

Caracterizando a complexidade de redes neuronais teóricas em termos de distribuições de motivos

DOMINGUES, Guilherme Schmidt¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

guilherme.domingues@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os modelos usados pela Ciência, como as Redes Complexas, têm características topológicas variáveis, resultando em níveis de complexidade diferentes. (1) Uma possível forma de mensurar a complexidade de redes é através da variabilidade das distribuições dos motivos presentes nelas, porém a identificação de motivos é normalmente feita de forma supervisionada e o entendimento de como as partes de uma rede influenciam na sua complexidade emergente permanece um problema em aberto. Neste trabalho, usamos um novo método desenvolvido para identificação de motivos, estatístico e não-supervisionado, empregando uma medida de semelhança recentemente proposta, para definir os motivos de diferentes variações de um modelo teórico de redes neurais morfológicas e estimar a complexidade dessas redes através da entropia da distribuição de frequências dos motivos. (2-3) As complexidades dos motivos são caracterizadas e as complexidades resultantes das redes são comparadas sob a perspectiva de utilizar a frequência dos motivos encontrados para melhor entender as origens das alterações na complexidade dos modelos.

Palavras-chave: Ciência de redes. Identificação de motivos. Complexidade.

Agência de fomento: CAPES (88887.601529/2021-00)

Referências:

- 1 COSTA, L. F.; DOMINGUES, G. Cost-based approach to complexity: a common denominator? **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 44, p. e20210279-1-e20210279-14, 2022. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2021-0279.
- 2 DOMINGUES, G. S.; TOKUDA, E. K.; COSTA, L. F. Identification of city motifs: a method based on modularity and similarity between hierarchical features of urban networks. **Journal of Physics**, v. 3, n. 4, p. 045003, Oct. 2022. DOI: 10.1088/2632-072X/ac9446
- 3 COSTA, L. F. Coincidence complex networks. **Journal of Physics**, v. 3, n. 1, p. 015012, mar 2022.

PG3

The time-dependent real-space numerical renormalization group formulation

OLIVEIRA, Luiz Nunes de¹; D'AMICO, Irene²; PICOLI, Felipe Donizete¹

felipepicoli@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²University of York

Time-dependent characteristics of strongly correlated electronic systems have received a great deal of attention due to interest in the non-equilibrium aspects of quantum devices. The description of the long-time behavior presents difficulties in Kondo systems and comparable impurity concerns. It has been shown that the Numerical Renormalization Group (NRG) approach, which produces almost precise predictions for the equilibrium thermodynamical, excitation, and transport properties of such systems, is less reliable in this situation. Artificial oscillations, a direct result of the logarithmic discretization at the core of the NRG architecture, plague the computed time-dependent curves. Here, we use a comparable but more adaptable strategy: the recently developed real-space formulation known as eNRG. (1) We compute the time-dependent photocurrent in a simple XPS procedure, the photoejection of a core electron from a simple metal. The foundation of our eNRG architecture is a unidimensional lattice with a tight-binding Hamiltonian coupling τ between adjacent sites. We use a suddenly generated potential at one of the lattice sites to define the final-state Hamiltonian, which simulates the electrostatic interaction with the core hole brought on by the photoejection. The resulting spectrum comprises a bound state and uniformly phase-shifted extended states. We contrast two smoothing techniques to remove the effects of the discretization: (i) randomization of the couplings τ , similar to Micklitz *et al.* (2), and (ii) uniform displacement of the conduction levels. The resulting photocurrents oscillate with the energy necessary to excite an electron from the bound state to the Fermi level and decay with the Doniach-Sunjić power law, which is in great agreement with physical expectations. (3)

Palavras-chave: Numerical renormalization group. X-Ray photoemission. Time-dependent numerical renormalization group.

Agência de fomento: FAPESP (2022/09312-4)

Referências:

- 1 FERRARI, A. L.; OLIVEIRA, L. N. Real-space numerical renormalization group computation of transport properties in side-coupled geometry. **Physical Review B**, v. 106, p. 075129-1-075129-34, Aug. 2022.
- 2 MICKLITZ, T. *et al.* Emergence of Fermi's golden rule. **Physical Review Letters**, v. 129, n. 14, p. 140402-1-140402-6, Sept. 2022.
- 3 DONIACH, S; SUNJIC, M. Many-electron singularity in X-ray photoemission and x-ray line spectra from metals. **Journal of Physics C**, v. 3, n. 2, p. 285-291, Feb. 1970.

PG4

Instabilidade de Rayleigh-Taylor quântica em condensados de Bose-Einstein bidimensionais

CUNHA, Pedro Henrique Cook¹; CASTILHO, Patricia Christina Marques¹

pedrocook@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na interface entre dois fluidos, o movimento relativo entre eles e a aplicação de forças externas podem levar ao surgimento de modulações que evoluem exponencialmente no tempo, resultando na chamada instabilidade de Kelvin-Helmholtz. Em particular, quando esses fluidos estão em repouso um em relação ao outro e o fluido mais denso é empurrado contra o de menor densidade, geralmente pela gravidade, ocorre o surgimento de perturbações que se parecem com cogumelos, o que caracteriza então a instabilidade de Rayleigh-Taylor (RTI). As propriedades de superfluidez presentes em gases ultrafrios, sejam eles Condensados de Bose-Einstein (BECs) ou Gases de Fermi, juntamente com os mais recentes avanços em tecnologias ópticas, como é o caso do Digital Micromirror Device (DMD), possibilitam o estudo desses tipos de instabilidades hidrodinâmicas clássicas mas no regime quântico. (1-3) Portanto, almejamos nesta pesquisa desenvolver um sistema experimental capaz de criar as condições necessárias para observar a RTI em BECs. Para isso, será utilizado um condensado bidimensional (2D) de potássio, que será separado em dois estados hiperfinos, o que originará dois superfluidos imiscíveis distintos. Esta separação, assim como o gradiente de forças que empurrará um fluido contra o outro, serão produzidos por meio de potenciais ópticos 2D gerados com um DMD, o que, em conjunto com o uso de técnicas de ressonância de Feshbach, nos fornecerá um controle quase que total sobre as interações e perturbações do sistema experimental.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstein. Fluidos quânticos. Gases quânticos com dimensões reduzidas.

Agência de fomento: FAPESP (2022/09880-2)

Referências:

- 1 TAKEUCHI, H. *et al.* Shear-flow instability in two-component Bose-Einstein condensates. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 158, n. 3-4, p. 384-390, 2010.
- 2 VILLE, J. *et al.* Loading and compression of a single two-dimensional Bose gas in an optical accordion. **Physical Review A**, v. 95, n. 1, p. 013632-1-013632-7, 2017.
- 3 HERNANDEZ-RAJKOV, D. *et al.* Universality of the superfluid Kelvin-Helmholtz instability by single-vortex tracking. **arXiv preprint arXiv:2303.12631**. 2023. DOI: 10.48550/arXiv.2303.1263

PG5

Terapia fotodinâmica em microambientes fabricados via polimerização por absorção de dois fótons

SAPIO, Clara Andrade¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

clarasapio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O desenvolvimento da microfabricação pela técnica de polimerização via absorção de dois fótons vêm ganhando notoriedade no campo da biofotônica. O uso dessa técnica aliada ao estudo biológico de ambientes e dos microrganismos a serem utilizados possibilitou a criação de microambientes biocompatíveis para estudos de proliferação, adesão e migração bacteriana, constituindo uma área de estudo de grande interesse para o campo interdisciplinar da Física e da Biologia. (1) Para que isso fosse possível, a utilização de um laser de pulsos ultracurtos mostrou-se de grande importância para a promoção do fenômeno não linear da absorção de dois fótons e, conseqüentemente, da reação de polimerização quando a radiação interage com a amostra composta por uma resina com monômeros e fotoiniciador. Projetada a matriz de estruturas e realizada a sua fabricação na amostra, diferentes geometrias podem servir para o estudo de bactérias de dimensões compatíveis com as estruturas fabricadas e pode-se analisar a influência de parâmetros geométricos no desenvolvimento de microrganismos, além de caracterizar o fator de biocompatibilidade destes últimos com os materiais da resina polimérica, constituintes das estruturas dos microambientes. (2) Dessa forma, o presente plano de pesquisa tem por objetivo inicial realizar a fabricação de microambientes fazendo uso do laser de femtosegundos de Ti:safira para promover a reação de polimerização por absorção de dois fótons, fabricando estruturas que serão usadas como microambientes controlados para estudos da bactéria da espécie *Cutibacterium acnes*, causadora da doença de pele da acne. Para complementar a análise do desenvolvimento da *C. acnes* nos microambientes, pode-se também explorar a possibilidade de eliminar estas bactérias por meio da reação fotodinâmica promovida pela ação de fotossensibilizadores e fontes de luz adequadas de acordo com as suas bandas de absorção. (3) Assim, pode-se utilizar os microambientes fabricados para estudos *in vitro* com vistas a avaliar a eficácia da terapia fotodinâmica, na tentativa de eliminar a carga bacteriana das *C. acnes* através do uso de radiação no comprimento de onda que o fotossensibilizador absorve e gera radicais que podem matar as células das bactérias. Nestes microambientes, será averiguada a relação de biocompatibilidade da resina com o microorganismo e, por fim, será verificada a eficiência do uso da terapia fotodinâmica para eliminar as bactérias dos microambientes.

Palavras-chave: Polimerização via absorção de dois fótons. Microambientes. Terapia Fotodinâmica

Agência de fomento: CAPES (88887.821557/2023-00)

Referências:

1 NGUYEN, A. K.; NARAYAN, R. J. Two-photon polymerization for biological applications. **Materials Today**, v. 20, n. 6, p. 314-322, 2017.

2 MORAES, J. Q. R. **Fabricação de arcabouços 3D via fotopolimerização por absorção de dois fótons para biofotônica.** 2020. Trabalho de Conclusão de Curso - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

3 ANNUNZIO, S. R. **Avaliação da terapia fotodinâmica contra biofilmes acneicos polimicrobianos: um estudo pré-clínico.** 2022. Tese (Doutorado) - Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Araraquara, Universidade Estadual Paulista "Julio de Mesquita Filho", Araraquara, 2022.

PG6

Mecanismo de aceleração de Fermi sob a hipótese de quebra de invariância de Lorentz

DUARTE, Matheus¹; SOUZA, Vitor de¹

matheus_duarte@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A teoria da relatividade resultou em grandes mudanças na forma em que compreendemos os fenômenos da natureza. Seus resultados foram testados em vários experimentos, porém considerações teóricas indicam que discrepâncias podem ser encontradas em regimes de altíssimas energias. Os desenvolvimentos teóricos neste campo levaram à sugestão e investigação da violação da invariância de Lorentz (LIV da sigla em inglês), a qual é prevista e suportada em diferentes modelos da física das mais altas energias. A invariância de Lorentz é um dos pilares da relatividade e sua violação resultaria em novos fenômenos físicos passíveis de testes em certas regiões de parâmetros. Uma das principais formas de se estudar tais regimes energéticos é a análise de raios cósmicos, e, neste ponto, os mecanismos de aceleração destes ainda não são completamente entendidos, principalmente na classe dos Raios Cósmicos Ultra Energéticos (UHECR). Neste trabalho, partindo de uma relação de dispersão modificada, $E^2 = m_0^2 + p^2 + \delta_n p^n$, iremos deduzir um novo espectro para o mecanismo de Fermi de primeira e segunda ordem com a suposição de quebra de invariância de Lorentz, definido pelo parâmetro livre δ_n presente na hipótese de trabalho inicial. (1) Seguiremos para uma comparação com os dados obtidos pelo Pierre Auger, onde focaremos no ajuste da curva do espectro de raios cósmicos para energias superiores à 10^{18} eV (UHECR). (2) O ajuste nos dará o valor do parâmetro de quebra δ_{LIV} , e será feito com o mecanismo de primeira ordem, o qual consideramos ser dominante, e assim buscaremos explicar o brusco decaimento visto no espectro de raios cósmicos na ordem de 10^{20} eV. Ainda neste mesmo quadro de trabalho, estudamos os limites teóricos do mecanismo de aceleração de Fermi, onde não obtivemos nenhuma mudança significativa nas previsões. Além disso, buscamos modificar a invariância de Lorentz no caso do mecanismo de Fermi relativístico, onde possivelmente poderemos encontrar uma contribuição apreciável do mecanismo de segunda ordem, antes desprezado. (3)

Palavras-chave: Raios cósmicos. Relatividade. Fermi

Agência de fomento: CAPES (88887.839584/2023-00)

Referências:

- 1 LONGAIR, M. S.; YPDH, G. B. High energy astrophysics. **Physics Today**, v. 48, n. 7, p. 54-56, 1995.
- 2 AAB, A. *et al.* Measurement of the cosmic-ray energy spectrum above 2.5×10^{18} eV using the Pierre Auger Observatory. **Physical Review D**, v. 102, n. 6, p. 062005, 2020.
- 3 GALLANT, Y. A.; ACHTERBERG, A. Ultra-high-energy cosmic ray acceleration by relativistic blast

waves. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v. 305, n. 1, p. L6-L10, 1999.

PG7

Searching for heavy dark matter with gamma-rays

SIQUEIRA, Clarissa¹; JUSTINO, Lucca Radicce¹; VIANA, Aion¹

lradicce@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

One of the most intriguing problems in particle physics and cosmology nowadays is the called dark matter problem. We have several evidences, like galaxy rotation curves, galaxy cluster collision, baryon acoustic oscillation, structure formation, among others, implying that we need a new particle, beyond the standard model of particle physics (SM), to explain the major matter component of the universe and to address all these evidences. The attempts to discover the DM particle could be via collider, direct (DD) and indirect (ID) detection searches. In the ID scenario DM may self-annihilate on stable SM particles, such as neutrinos, cosmic-rays and gamma-rays, which can be detected by experiments on Earth. (1) A viable model for DM particle must predict the observed abundance as a thermal relic of the early universe (in the WIMP paradigm through a freeze-out mechanism). Indirect detection searches restrict the parameter space $\langle \sigma v \rangle \times m_{DM}$ and are complementary to relic abundance and direct detection limits. In this work we study the phenomenology of a specific model of DM particle (the inert doublet model) and we evaluate the sensitivity of gamma-ray observatories (like CTA) to detect a signal in the Galactic Center (GC) region. (2)

Palavras-chave: Gamma astronomy. Dark matter. Indirect detection.

Agência de fomento: FAPESP (2022/01962-0)

Referências:

- 1 LEFRANC, V.; MOULIN. E.; PANCI P.; SILK J. Prospects for annihilating dark matter in the inner galactic halo by the cherenkov telescope array. **Physical Review D**, v. 91, n. 12, p. 122003, 2015.
- 2 FABIAN, S.; GOERTZ, F.; JIANG, Y. Dark matter and nature of electroweak phase transition with an inert doublet. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2021, n. 11, p. 1-18, 2021.

PG8

Dissipative adaptation of driven spin-boson model

PINTO, Diogo Soares¹; AFONSO, Ricardo¹; VALENTE, Daniel²; GOETTEMMS, Elisa Iahn¹

elisagtt@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT

One example of applicability of nonequilibrium statistical physics is to explain how biological systems work. In these systems, the definition of the thermodynamic quantities should be revised to account for the irreversibility of the process. In this scenario, the dissipative adaptation hypothesis (1), proposed by Jeremy England, is a general thermodynamic mechanism that explains system self-organization through the dissipation of work absorbed from an external drive, which acts on the system over a period of time. It establishes how the most likely or adapted states of a system subjected to a given drive tend to be those following trajectories of highest work absorption, followed by dissipated heat to the reservoir. We can think of dissipative adaptation as being a generalization of the Gibbs distribution for systems far from equilibrium. Our idea, is using refs to study the quantum dynamics of a spin-boson systems (a two-level system) with time-dependent external drive and to evaluate the thermodynamic quantities of a self organization process, as absorbed work and heat dissipation. (2-3) In other words, we will have an asymmetric double well potential, after some time a pump of energy is added through a variable that can be chosen according to experimental background or other parameters of the system. Our goal is to show that the drive in an asymmetric potential is able to localize a particle in one of the bottoms of the well and verify that in this transition occurred the highest work absorption followed by dissipation of energy. The relation with these thermodynamic quantities is derived using the path integral approach, introduced by Feynman-Vernon in 1959, which is a description of an open quantum system that has been used to study the dissipative dynamics of the quantum systems, known as the Caldeira-Leggett model of the quantum Brownian motion. (3)

Palavras-chave: Dissipação. Termodinâmica. Spin Boson.

Agência de fomento: CAPES (88887.476110/2020-00)

Referências:

- 1 ENGLAND, J. L. Dissipative adaptation in driven self-assembly. **Nature Nanotechnology**, v. 10, n. 11, p. 919-923, 2015.
- 2 VALENTE, D.; BRITO, F.; WERLANG, T. Quantum dissipative adaptation. **Communications Physics**, v. 4, n. 1, p. 1-8, 2021.
- 3 FUNO, K.; QUAN, H. T. Path integral approach to quantum thermodynamics. **Physical Review Letters**, v. 121, n. 4, p. 040602, 2018.

PG9

Mega Protein: Cryo-EM structural determination a 8 MDa molluscan hemocyanin with substantial biomedic impact

ELLENA, Matías Nahuel¹; FERNÁNDEZ, Víctor Castro¹; AMBROSIO, Andre Luis Berteli¹; LEGUIA, Victoria Cristina Guixe¹; MUÑOZ, Sebastián Manuel¹

matiasne@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

With the ability to provide high resolution structural information of large and dynamic protein complexes, the single-particle cryo-electron microscopy (cryo-EM) turned possible study of proteins that were almost impossible to analyze with previous methods, due to its huge size and flexibility. So through collaborative efforts between research groups from Chile and Brazil, a synergistic approach to determine the cryo-EM structure of the hemocyanin from *Concholepas concholepas* (CCH), a marine organism endemic to the southern Pacific coasts, became possible. Hemocyanins are megadalton-sized oligomers that participate in oxygen transport in multiple invertebrate organisms, used as natural, non-toxic, and nonspecific immunostimulants with critical biomedical and clinical applications; thus, understanding the precise molecular mechanisms of hemocyanins is essential for future targeted improvement. So far, the most well-studied hemocyanin from a structural and immunological standpoint is KLH, from *Megathura crenulate*, that had its functional units revealed through the combination of cryo-EM and X-ray crystallography, displaying highly symmetric homodecameric rings featuring extensively glycosylated regions. However, regardless of their similarities, marine hemocyanins present a significant degree of structural diversity among them, especially concerning glycosylation patterns, which might explain their unequal efficiency in generating appropriate adjuvant effects on immunological oriented therapies. The CCH has shown promising biomedical applications, with a higher stability and solubility when compared with homologs. (1) Nevertheless, despite the unique biomedical potential of CCH, its structure and even its amino acid sequence remain unknown. With two distinct polypeptide chains forming heterodimeric rings, each subunit presents eight copper globular oxygen-binding domains, termed functional units (FU), and up to 3 or 4 glycosylation sites. Thus, a 3,2 Å Cryo-EM map was built allowing the construction of the whole 8 MDa protein structure with all its FU and glycosylations.

Palavras-chave: Cryo-EM. Protein. Hemocyanin.

Agência de fomento: FAPESP (2021/03998-9)

Referências:

1 REYES, D. *et al.* Tumour celllysate-loaded dendritic cell vaccine induces biochemical and memory immune response in castration-resistant prostate cancer patients. **British Journal of Cancer**, v. 109, n. 6, p. 1488-1497, 2013.

PG10

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

MARTINEZ, Vinicius José¹; HENN, Emanuel Alves de Lima¹

vinicius.martinez@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos últimos anos, os sistemas para estudos de átomos frios têm se tornado cada vez mais complexos e mutáveis. (1) Um experimento em particular, que envolve a produção de um condensado de Bose-Einstein, utiliza múltiplos feixes de luz em diferentes direções do espaço, com intensidades que podem variar significativamente. No entanto, o manuseio preciso dessas amostras quânticas é geralmente limitado pela falta de acesso óptico e pela configuração do sistema. Como resultado, a maioria dos sistemas experimentais atuais divide fisicamente os processos: o aprisionamento e o resfriamento ocorrem em uma câmara de vácuo, e depois que a amostra quântica é obtida, os átomos são transferidos fisicamente para uma câmara adjacente, onde não há restrições de acesso óptico ou manipulação da amostra. Existem várias técnicas para transportar átomos, desde armadilhas magnéticas com bobinas móveis até armadilhas ópticas com o deslocamento do ponto focal. (2) Por sua simplicidade de implementação, o deslocamento do ponto focal de um laser de alta potência na região do infravermelho, que cria uma armadilha óptica com os átomos confinados, é amplamente utilizado. Geralmente, as distâncias percorridas são da ordem de dezenas de centímetros até pouco mais de um metro, e há transladores lineares comerciais disponíveis que podem fazer esse movimento de forma precisa, reprodutível e programável. No entanto, é consenso que quanto maior a distância a ser percorrida, maiores são os requisitos de estabilidade, precisão e espaço físico necessário, já que os transladores exigem pelo menos a mesma distância para operar. Portanto, estratégias que possam reduzir o uso do espaço e a distância de deslocamento do sistema óptico são desejáveis. Recentemente, Lee e colaboradores demonstraram o uso de um sistema de transporte óptico baseado em uma *Optically Compensated Zoom Lens* (OCZ). (3) Eles demonstraram, por meio de simulações e experimentos, que é possível deslocar o ponto focal do sistema óptico em cerca de 1,5 m movendo o conjunto de lentes em apenas 7 cm, simplificando assim os processos de transporte. O objetivo deste trabalho foi implementar e caracterizar completamente um sistema de transporte de átomos de Disprósio em uma armadilha óptica, usando um sistema OCZ especificamente projetado para o nosso laboratório. Para isso, caracterizamos um sistema de transporte de átomos frios de Disprósio, usando cinco configurações diferentes de lentes no sistema OCZ e uma dezena de parâmetros T que representam o espaçamento entre as lentes de cada grupo. Para os deslocamentos intra-grupo de lentes, utilizamos um espaço de movimento que variou de 15 mm a 85 mm, resultando em uma alteração no ponto focal de 100 mm a 1500 mm de distância, com intervalos de deslocamento variando de 330 mm a 810 mm e cinturas de feixes (*waist*. ω no ponto focal variando de 36 μm a 130 μm . Com isso, reduzimos o espaço necessário usado para o transporte e ainda mostramos um sistema mais estável e viável economicamente.

Palavras-chave: Transporte de átomos. OCZ. Armadilha de dipolo óptico.

Agência de fomento: CNPq (132147/2021-1)

Referências:

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

PG11

Aprimoramento de medidas de campos microondas utilizando átomos de Rydberg em células quentes

KONDO, Jorge Douglas Massayuki¹; MAGALHÃES, Daniel Varela²; BORGES, Ben-Hur Viana³; PEPINO, Vinicius Marrara³; MARCASSA, Luis Gustavo²; GOMES, Naomy Duarte²

naomy.gomes@usp.br

¹UFSC; ²Instituto de Física de São Carlos - USP; ³Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Neste trabalho, aplicamos a espectroscopia de polarização para aprimorar a eletrometria de microondas baseada em átomos de Rydberg, por meio da medição do desdobramento de Autler-Townes em um espectro de transmissão de transparência induzida eletromagneticamente (EIT) em uma célula de vapor em temperatura ambiente. (1-3) Conseguimos melhorar a amplitude mínima detectável do campo elétrico de microondas por um fator de $\simeq 5$ em comparação com o EIT convencional. Além disso, o uso de uma lente cilíndrica de micro-ondas nos permitiu triplicar o campo elétrico de micro-ondas na célula de vapor, melhorando o limite em outro fator de $\simeq 3$. Portanto, obtivemos um fator total de $\simeq 15$, demonstrando o potencial dessas técnicas na eletrometria de microondas com átomos de Rydberg em uma célula de vapor.

Palavras-chave: Transparência eletromagneticamente induzida. Átomos de Rydberg. Microondas.

Agência de fomento: CNPq (142410/2019-5)

Referências:

- 1 HARRIS, M. L. *et al.* Polarization spectroscopy in rubidium and cesium. **Physical Review A**, v. 73, n. 6, p. 062509, 2006.
- 2 SEDLACEK, J. A. *et al.* Microwave electrometry with Rydberg atoms in a vapour cell using bright atomic resonances. **Nature Physics**, v. 8, n. 11, p. 819-824, 2012.
- 3 MARANGOS, J. P. Electromagnetically induced transparency. **Journal of Modern Optics**, v. 45, n. 3, p. 471-503, 1998.

PG12

A quantum model for seizures

ARAUJO, Hugo Sanchez de¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

hugo.sanchezdearaujo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Understanding the complex behavior of neuronal dynamics has become one of the most important topics in modern neurology and biophysics since it is directly connected with neuronal disorders. The brain is responsible for controlling multiple processes such as emotions, vision, motor skills, breathing, and memory. The main structure that makes this accurate level of control possible is the neuronal network, capable of sending and receiving electrical stimuli along the whole body, where different signals are interpreted as a specific sensation or command. Based on the intensity of received electrical stimulation, a neuron can either become excited and generate a firing response or remain at rest. When the stimulus is sufficiently strong, reaching an electrical potential threshold of approximately -55 mV, the neuron's cell membrane depolarizes due to an influx of sodium ions, generating a signal known as the action potential. (1) Information is propagated within the neuronal network through electrical synapses, which are gap junctions allowing direct communication, and chemical synapses, involving the release of neurotransmitters. These synapses can result in excitatory or inhibitory responses in postsynaptic neurons. The balance between excitation and inhibition is crucial for normal brain function. However, when this balance is disrupted and excitation prevails over inhibition, neurons may begin to fire synchronously, leading to partial or generalized seizures, involving a specific or total area of the brain respectively. In 1996, Penrose and Hameroff proposed the hypothesis that microtubules present in neurons could exhibit quantum behavior in a state of superposition. (2) Despite this proposal, no observations were obtained confirming the existence of quantum coherence in brain microtubules. Thus, the idea of quantum effects in the brain had not been widely accepted and remained an open topic of investigation. However, recent experimental evidence presented by Kerskens and Pérez, who collected signals through nuclear magnetic resonance, may indicate entanglement mediated by consciousness-related brain functions. (3) Along the line of approaching biological phenomena through quantum mechanics, we describe the neuronal network as a set of coupled spin-boson open quantum systems. Consequently, the synchronous firing characterizing seizures is modeled as a superradiance-like phenomenon, the superradiance being a collective effect that occurs when a moderately dense atomic sample interacts with its environment and the electromagnetic radiation it emits. Instead of emitting radiation independently and randomly, the atoms synchronize their emissions to release energy in a highly coherent pulse. In our neuronal network description, we demonstrate that a synchronized emission of multiple superradiant pulses is generated when the neurons are strongly connected to each other, corroborating the fact that both the frequency and the intensity of the pulses are distinctive features of seizures.

Palavras-chave: Seizures. Spin-boson model. Superradiance.

Agência de fomento: CAPES (88887.643375/2021-00)

Referências:

- 1 KANDEL, E. R. *et al.* **Principles of neural science**. 4th ed. New York: McGraw-Hill, 2000. 1230 p.
- 2 HAMEROFF, S.; PENROSE, R. Orchestrated reduction of quantum coherence in brain microtubules: a model for consciousness. **Mathematics and Computers in Simulation**, v. 40, n. 3-4, p. 453-480, Apr. 1996.
- 3 KERSEKENS, C. M.; PÉREZ, D. L. Experimental indications of non-classical brain functions. **Journal of Physics Communications**, v. 6, n. 10, p. 105001, Oct. 2022.

PG13

A Computational Approach for Image-Based Monitoring and Morphological Characterization of Skin Lesions

PALAMONI, Otávio¹; MORIYAMA, Lilian Tan¹

palamoni@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Measuring and quantifying the progression or treatment of wounds, scars, and tumors constitutes a fundamental aspect of our research group projects. The accuracy of such assessments can be compromised due to the irregularity and dimensions of the lesions, as well as the variability introduced by operators during measurements. To address these challenges, we have developed two image processing methods using Python that utilize images captured by webcams or cellphones. The first method involves the creation of depth maps, enabling 3D object reconstructions using point clouds. Additionally, five image processing methods based on RGB data were developed to facilitate automatic, practical, and observer-independent visualization of lesions. Camera distortions, such as pincushion and barrel distortions resulting from the lens, are prevalent. To rectify these distortions, we have implemented a script using OpenCV that can correct the captured images. Upon undistorting the images, we utilize Epipolar Geometry to calculate the depth of each pixel in the 2D image by recognizing corresponding real points in both image sources. (1) Two depth calculation methods have been developed based on the results obtained from Epipolar Geometry. The first method is a stereo setup that directly implements a stereo system, while the second method (the primary one) employs a single image (Mono Imaging) and utilizes a neural network to displace the image and treat it as the second image for depth calculation. The advantages of utilizing artificial intelligence (AI) for depth calculation include faster processing, improved resource efficiency, and enhanced precision by reducing the likelihood of human error. However, the stereo method is still under development for scenarios where the AI may be deceived, such as cases involving reflections. Once a depth map is obtained, we can proceed with 3D reconstruction using point clouds, enabling visualization in three dimensions. We are currently working on converting point clouds to meshes, which will facilitate volume calculations and use in Monte Carlo simulations—an area of growing interest within our research group. Furthermore, we have developed five methods that leverage RGB channels to enhance lesion visualization. (2) These methods aim to highlight the respective areas, mitigating user-dependent subjectivity and enabling a more standardized approach. The primary focus of this software is to provide a user-friendly and accessible tool that establishes standards within our research group. Moreover, the software is open-source, allowing users to contribute improvements tailored to their specific needs. Importantly, our software is independent of third-party limitations, ensuring unhindered usage and adaptability to evolving research requirements. In the next steps, we intend to continue the improvement of the capabilities and functionality of the software, further advancing its performance in image analysis and visualization, as well as adding the ability to generate 3D meshes via Point Clouds and a Graphic User Interface (GUI) for easier usage. Lesions from patients and in vivo experimental models will be used to validate the developed methods. (3)

Palavras-chave: Depth estimation. Image processing. Lesion monitoring.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 JAIN, R. *et al.* **Machine vision**. New York: McGraw-Hill, 1995.
- 2 SAKNITE, I. *et al.* Comparison of single-spot technique and RGB imaging for erythema index estimation. **Physiological Measurement**, v. 37, n. 3, p. 333, 2016. DOI: 10.1088/0967-3334/37/3/333
- 3 HANOCKA, R. *et al.* **Point2mesh**: a self-prior for deformable meshes. Disponível em: arXiv preprint arXiv:2005.11084, 2020. DOI: 10.1145/3386569.3392415

PG14

Melhoramento das propriedades físico-químicas do anti-hipertensivo Hidroclorotiazida

FIRMINO, Pollyana Pereira¹; ELLENA, Javier¹; SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da¹; SANTIAGO, Pedro Henrique de Oliveira¹

pollyana.firmino@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Hidroclorotiazida (HTZ) é um anti-hipertensivo pertencente à classe dos diuréticos tiazídicos, que controla os valores da pressão arterial e reduz efetivamente a morbimortalidade cardiovascular em adultos e idosos. (1) Infelizmente, este medicamento possui baixa solubilidade e permeabilidade, sendo classificado como classe IV no Sistema de Classificação Biofarmacêutica, o que gera problemas de absorção no organismo. A eficácia de um fármaco está principalmente associada às suas propriedades no estado sólido, como diferentes formas solidas podem alterar as propriedades físicas e químicas de um composto, o uso da engenharia de cristais engloba o o aspecto econômico, proporcionando redução nos custos de desenvolvimento de fármacos. (2) A fim de obter novas formas solidas considerando a química verde, os cocristais aqui apresentados foram obtidos por meio da mecanoquímica, ou seja com uso de pouco ou nenhum solvente e com alto grau de pureza. (3) Para melhorar as propriedades físico-químicas da HTZ, dois coformadores diferentes foram usados, o aminoácido L-prolina e a pró-droga 5-fluorocitosina formando os cocristais denominados HTZLP e HTZ-5FC respectivamente. Este material foi analisado por difração de raios X monocristal e de pó, análises térmicas e ensaios de solubilidade relativa. Eles cristalizaram no sistema cristalino monoclinico, no grupo espacial $P2_1$ para HTZLP e $P2_1/n$ para HTZ-5FC. As estruturas são principalmente estabilizadas por pontes de hidrogênio dos tipos NHO e NHN nos grupos sulfonamida primários e secundários com os coformadores. HTZLP funde a 191,0 °C, iniciando a degradação a 210 °C, e HTZ-5FC funde a 238,0 °C, iniciando a degradação a 260°, mostrando um elevado valor de estabilidade termica. Os testes de solubilidade relativa à temperatura ambiente mostraram que os cocristais HTZLP e HTZ-5FC aumentam a solubilidade do HTZ, sendo que o cocrystal HTZ-5FC mostrou ser o mais eficiente nesta propriedade.

Palavras-chave: Engenharia de cristais. Cocristais. Solubilidade relativa.

Agência de fomento: CNPq (160856/2021-3)

Referências:

- 1 REYES, A. J. Diuretics in the therapy of hypertension. **Journal of Human Hypertension**, v. 16, n. 1, p. S78-S83, 2002. DOI: 10.1038/sj.jhh.1001349.
- 2 SHAH, V. P. *et al.* A theoretical basis for a biopharmaceutic drug classification: the correlation of in vitro drug product dissolution and in vivo bioavailability. **Pharmaceutical Research**, v. 12, n. 3, p. 413-420, 1995.

3 JAMES, S. L. *et al.* Mechanochemistry: opportunities for new and cleaner synthesis. **Chemical Society Reviews**, v. 41, n. 1, p. 413-447, 2012. DOI: 10.1039/C1CS15171A.

PG15

Excitation of Bose-Einstein condensates with temporal resolution in separate zones

SANTARELLI, Monica Caracanhas¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; MADEIRA, Lucas¹; MACHADO, Leandro Alves¹

lemachado@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

One manifestation of superfluidity in a Bose-Einstein condensate (BEC) is the emergence of the so-called collective modes. Due to the breaking of gauge symmetry U , the system acquires a macroscopic wavefunction with a global phase that can be described by the Gross-Pitaevskii equation (GPE) under a mean-field treatment, where, by an hydrodynamic description, the eigenfrequencies of those modes can be obtained. (1) We start by considering a BEC made of ^{87}Rb atoms with repulsive interaction in an anisotropic harmonic magnetic trap under action of an oscillating magnetic field being applied at the BEC elongated direction, which firstly causes an abrupt change in the potential and excites the cloud's center of mass motion around the minimum of the potential. (2) This mode is known as the dipolar mode. Besides the dipolar mode, collective modes inherent to the shape of the BEC might be exciting. In that case, the so-called quadrupole mode and the breathing mode may arise, characterized by out-of-phase and in-phase oscillations of the BEC widths, respectively. The oscillation frequency of these modes is strongly dependent on the non-linear contribution of the GPE related to the system's interaction and the configuration of the trap anisotropy. The emergence of these highly coherent modes when externally excited offers an interesting analogy with an atom being irradiated by a resonant laser beam. Despite the fundamental differences between the two systems, they share a fundamental common property - coherence. This analogy raises the idea of achieving precise control over these coherent modes in a BEC, inspired by the Rabi and Ramsey experiments. In order to do that, the external oscillation will be modulated by a signal which can be either Rabi-like or Ramsey-like. The difference between them is the splitting of a square pulse into two separate zones, which enables interference phenomena in the resonance curve such as the Ramsey fringes. (3) Moreover, with this method, for strongly excited samples using the Ramsey-like procedure, we expect to be able to analyze the persistence of coherence of these samples as a consequence of interference from a fragmented BEC. Thus, the main proposal of this work is the development of theoretical models and the elaboration of computer simulations that will reproduce the experiments that are currently being carried out in order to get more knowledge about how an external signal can modulate and also select a specific path in the route of turbulence.

Palavras-chave: Coherence. Ramsey fringes. Quantum turbulence.

Agência de fomento: CAPES (88887.822682/2023-00)

Referências:

1 PETHICK, C. J.; SMITH, H. **Bose Einstein condensates in dilute gases**. 2nd ed. Cambridge:

Cambridge University Press, 2008.

2 MIDDLETON-SPENCER, H. A. J. *et al.* **Evidence of strong quantum turbulence in Bose-Einstein condensates**. 2022. Available at: <https://arxiv.org/pdf/2204.08544.pdf>. Accessible at: 30 Apr. 2023.

3 RAMSEY, N. F. Experiments with separated oscillatory fields and hydrogen masers. **Reviews of Modern Physics**, v. 62, n. 3, p. 541-553, July 1990.

PG16

Átomos de Rydberg térmicos interagindo com campos de Micro-ondas

ALVES JUNIOR, Eliel Leandro¹; MARCASSA, Luiz Gustavo¹

elieljunior@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Átomos de Rydberg são extremamente sensíveis à campos eletromagnéticos de micro-ondas. Neste projeto, propomos estudar átomos de Rydberg térmicos utilizando EIT (transparência eletromagnética induzida) na presença de um campo de micro-ondas (MW). (1-2) Atualmente, existem limites no menor campo detectável por essa técnica. Planejamos estender esse limite utilizando uma lente de uma MW e a técnica de espectroscopia de polarização com feixes Laguerre-Gauss. (3)

Palavras-chave: Átomos de Rydberg. Transparência eletromagnética induzida (EIT). Laguerre-Gauss.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 MOHAPATRA, A. K. *et al.* A giant electro-optic effect using polarizable dark states. **Nature Physics**, v. 4, n. 11, p. 890-894, 2008.

2 GOMES, N. D.; MAGNANI, B. F.; KONDO, J. M.; MARCASSA, L. G. Polarization spectroscopy applied to electromagnetically induced transparency in hot rydberg atoms using a Laguerre-Gaussian beam. **Atoms**, v. 10, n. 2, p. 58-1-58-9, June 2022.

3 RODRIGUES, J. D.; MARCASSA, L. G.; MENDONÇA, J. T. Excitation of high orbital angular momentum Rydberg states with Laguerre–Gauss beams. **Journal of Physics B**, v. 49, n. 7, p. 074007-1-074007-7, Apr. 2016.

PG17

Antiplasmodial profiling of peptide-like molecules as lead candidates for malaria

GUIDO, Rafael Victorio Carvalho¹; MARTINS, Felipe Cardoso Prado²; MENDES, Giovana Rossi¹; MOURA, Igor Mota Rodrigues de¹; MONTANARI, Carlos Alberto²; BONATTO, Vinicius²; AGUIAR, Anna Caroline³

igormrmoura@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Química de São Carlos - USP; ³Universidade Federal de São Paulo - UNIFESP

Malaria is one of the most prevalent infectious diseases caused by *Plasmodium* genus parasites. Artemisinin resistance has been arising in some affected areas. (1-2) Hence, the development of new compounds against *Plasmodium* is highly needed. Small peptides have been reported as strong antimicrobial agents and their antiplasmodial activity has been investigated in the last few years. (3) This work focused on the parasitological profile of tri- and dipeptides against *P. falciparum*. We assessed the inhibitory activity of 15 tri- and dipeptides derivatives against the *P. falciparum*.3D7 strain. The most potent compound (Neq1153) showed an IC₅₀ value of $0.6 \pm 0.1 \mu\text{M}$ and a selectivity index against HepG2 cells of SI = 350. The time of action assay showed that Neq1153 is a slow-acting inhibitor with pronounced inhibitory activity over the mature forms of the parasite. The presence of Neq1153 caused a swallow of the digestive vacuole (Figure 1A), suggesting a possible mode of action. Next, we assessed the combination profile of Neq1153 with standard antimalarials (e.g., artesunate, chloroquine, atovaquone, and proguanil). Neq1153 showed an antagonistic profile when combined with artesunate and chloroquine. Conversely, the combination of the inhibitor with atovaquone and proguanil showed an additive profile. Finally, the assessment of Neq1153 against a panel of resistant strains of the parasite indicated that the compound showed no cross-resistance with K1 (RI = 1), Dd2 (RI = 0.1), TM90C6B (RI = 1), 3D7RMMV848 (RI = 1) and Dd2RDSM265 (RI = 0.1) strains (Figure 1C). Interestingly, Neq1153 exhibited a 10-fold increase in potency against Dd2 strain (chloroquine-resistant) when compared to the potency against 3D7 strain (chloroquine-sensitive). Modifications in R1 position led to a loss of potency, indicating that the aldehyde substituent in this position is essential for antiplasmodial activity against both the 3D7 and Dd2 strains. Modifications in R2 and R3 position were tolerated. Di- and tripeptides showed submicromolar potency against the chloroquine-sensitive strain of *Plasmodium falciparum* as well as a pronounced selectivity index (SI = 350). Neq1153 is a slow-acting *P. falciparum* inhibitor with activity peak in trophozoite forms, causing a swallow of the digestive vacuole. Moreover, Neq1153 showed no cross-resistance against a representative panel of resistant strains. These findings highlight the importance of an in-depth investigation to indicate the true potential of a new series of compounds as antimalarial candidates and that small peptide-like derivatives are attractive hits for an antimalarial drug discovery program.

Palavras-chave: Malaria. Peptide-like. Antiplasmodial.

Agência de fomento: FAPESP (2013/07600-3, 2020/12904-5, 2021-03977-1)

Referências:

- 1 SHIBESHI, M. A.; KIFLE, Z. D.; ATNAFIE, S. A. Antimalarial drug resistance and novel targets for antimalarial drug discovery. **Infection and Drug Resistance**, v. 2020, p. 4047-4060, Nov. 2020. DOI: 10.2147/IDR.S279433.
- 2 COWMAN, A. F.; HEALER, J.; MARAPANA, D.; MARSH, K. Malaria: biology and disease. **Cell**, v. 167, n. 3, p. 610-624, 2016. DOI: 10.1016/j.cell.2016.07.055.
- 3 MAHINDRA, A. *et al.* Antiplasmodial activity of short peptide-based compounds. **RSC Advances**, v. 5, n. 29, p. 22674-22684, 2015.

PG18

Antiplasmodial activity assessment of the natural compound batzelladine L and synthetic derivatives as lead candidates for malaria

BERLINCK, Roberto Gomes de Souza¹; BORGES, Natália Menezes Moreira²; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho²; MENDES, Giovana Rossi²; NORONHA, Anderson de Rienzo¹; JURBERG, Igor Dias³; PINHEIRO, Roberto do Carmo³; MOURA, Igor Mota Rodrigues de²; SOUZA, Ronei Messias Silva³; BARBOSA, Camila de Souza²; GOULART, Tales Antonio Camargo³

giquimica017@usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP; ²Instituto de Física de São Carlos - USP; ³Instituto de Química - UNICAMP

Malaria is a parasitic disease caused by the pathogenic protozoa *Plasmodium*. spp., which has a significant global impact on human health. (1) The increasing resistance of *P. falciparum*. strains to approved drugs highlights the urgent need for the discovery of new antimalarial candidates. Guanidine alkaloids emerged as promising natural products with antiparasitic activity. Batzelladines are tricyclic guanidine derivatives that exhibit potent biological activities, including antiparasitic. (2-3) In this investigation, we aimed at to investigate the parasitological profile of the natural alkaloid batzelladine L against *P. falciparum*. as well as of 43 synthetic guanidine derivatives as potential anti-plasmodial agents. The inhibitory activity of batzelladine L was first evaluated against chloroquine-sensitive *P. falciparum*. 3D7 strain. The natural alkaloid exhibited *P. falciparum*. inhibitory activity in the submicromolar range ($IC_{50}^{3D7} = 0.4 \pm 0.1 \mu M$), consistent with the previous report on the antiplasmodial activity of batzelladine L against a FcB1 chloroquine-resistant *P. falciparum*. strain ($IC_{50} = 0.3 \mu M$). (3) Furthermore, batzelladine L presented moderate cytotoxicity against HepG2 cells ($IC_{50}^{HepG2} = 14 \mu M$) with a selectivity index (SI) of 35. We subsequently investigated the parasitological profile of batzelladine L. Assessment of time of action revealed that the compound is a fast-acting inhibitor, exhibiting pronounced activity against *P. falciparum*. ring and trophozoite stages. Combination of batzelladine L with artesunate exhibited an antagonistic profile. Additionally, the inhibitory activity of batzelladine L was evaluated against a panel of *P. falciparum*. resistant strains. Results indicated no cross-resistance with the Dd2 (RI = 1.5), K1 (RI = 2.0), and Dd2RDSM265 (RI = 2.0) strains. Finally, we assessed the in vivo antimalarial activity of batzelladine L using *P. berghei*. NK65 strain in an animal model. The treated group showed a 33% reduction in parasitemia at day 5 post-infection. Such promising results led us to develop the synthesis of batzelladine L simplified analogues. Therefore, 43 guanidine derivatives were synthesized and tested against the *P. falciparum*. 3D7 strain. Among these derivatives, 24 exhibited significant antiplasmodial activity ($IC_{50}^{3D7} \leq 10 \mu M$). One derivative RCPA37P displayed inhibitory activity in the similar range of batzelladine L ($IC_{50}^{3D7} = 0.21 \pm 0.08 \mu M$) with improved selectivity against HepG2 cells (SI = 58). These findings suggest that both natural and synthetic guanidine derivatives hold promise as attractive compounds for the development of future lead candidates against malaria.

Palavras-chave: Malaria. Guanidine. *P. falciparum*.

Agência de fomento: FAPESP (2022/01063-5)

Referências:

- 1 PHILLIPS, M. A. *et al.* Malaria. **Nature Reviews Disease Primers**, v.3, p. 17050, 2017. DOI: 10.1038/nrdp.2017.50.
- 2 RANI, N. Z. A. *et al.* Fused tricyclic Guanidine alkaloids: insights into their structure, synthesis and bioactivity. **Marine Drugs**, v.20, n. 9, p. 579, 2022. DOI: 10.3390/md20090579.
- 3 LAVILLE, R. *et al.* Bioactive Guanidine alkaloids from two caribbean marine sponges. **Journal of Natural Products**, v. 72, n. 9, p. 1589-1594, 2009. DOI: 10.1021/np900244g.

PG19

In vivo anti tumoral and antiangiogenic activity of biomimetic nanoparticles using the chicken chorioallantoic membrane (CAM) assay

FERREIRA, Natalia Noronha¹; VERA, Carol Lizeth Ramos¹; QUITIBA, João Victor Brandão¹; RODERO, Camila Fernanda¹; BALTAZAR, Maria de Fátima Monginho²; COSTA, Marta Sílvia Freitas da²; MORENO, Natalia Sanchez¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

natalia.smoreno@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP; ²Life and Health Sciences Research Institute - UMinho

Glioblastoma (GBM) is a highly malignant brain tumor with a high risk of recurrence and mortality. Current GBM therapy has limited effectiveness due to the invasive and heterogeneous nature of the tumor. (1) Synthetic chromene-based molecules have proven their potential for cancer treatment, acting on several molecular targets involved in cancer progression. (2) Here, the chicken chorioallantoic membrane (CAM) assay was employed as a well-established *in vivo* model to investigate the antitumoral and antiangiogenic activity of cell membrane-coated poly(lactide-co-glycolide) (PLGA) nanoparticles (NPs) containing novel chromene-based molecules (mNP@CBM) against a 3D tumor formed by the U87 cell line implanted into the CAM. Our analysis revealed that tumors treated with the negative control (DMEM 10% FBS) exhibited an approximately 23% increase in size, whereas those treated with mNP@CBM showed a significant 19% regression in tumor growth. Furthermore, the substantial reduction in tumor size observed with mNP@CBM aligns with our previous findings regarding cell viability, demonstrating the therapeutic benefits of the cell-membrane coating process. To quantify blood vessel density, CAMs with tumors were excised and examined. Treatment with NPs resulted in a weakened vascular network, indicating a potential antiangiogenic effect associated with their antitumoral activity. These findings highlight the potential of the proposed delivery system in combating glioma cell lines. Therefore, developed nanoparticles may open a new therapeutic opportunity for GBM treatment.

Acknowledgments: This study was supported by CAPES

Palavras-chave: Glioblastoma. Biomimetic nanoparticles. CAM assay.

Agência de fomento: CAPES (88887.821847/2023-00)

Referências:

1 LEE, S.Y. Temozolomide resistance in glioblastoma multiforme. **Genes and Diseases**, v. 3, n. 3, p. 198-210, Sept. 2016.

2 COSTA, M. *et al.* Biological importance of structurally diversified chromenes. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v. 123, p. 487-507, July 2016. DOI: 10.1016/j.ejmech.2016.07.057.

PG20

Resposta fotodinâmica antimicrobiana em *Rhizopus oryzae*

MARQUES, Maria Júlia de Arruda Mazzotti¹; SOUSA, Fernanda Alves Dias de¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹; KURACHI, Cristina¹

maria.julia.marques@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Durante a pandemia da COVID-19, várias infecções secundárias surgiram em pacientes infectados, sendo uma delas a mucormicose, que é uma doença fúngica extremamente agressiva com uma elevada taxa de mortalidade, especialmente em pessoas com sistema imune comprometido. A maioria dos casos de mucormicose é causada pelo fungo *Rhizopus oryzae*, também conhecido como fungo negro. (1) Os tratamentos atualmente utilizados são baseados em doses elevadas dos antifúngicos anfotericina B e posaconazol, associadas a ressecções cirúrgicas quando possível. Contudo, mesmo com um tratamento antifúngico agressivo, a taxa de mortalidade atribuível estimada é elevada. Na ausência de desbridamento cirúrgico do tecido infectado, o tratamento antifúngico por si só não é curativo. (2) Por isso há necessidade de desenvolvimento de tratamentos adjuvantes. A Terapia Fotodinâmica antimicrobiana (TFDa) pode ser uma opção terapêutica auxiliar para a mucormicose. Durante o meu mestrado, foi estudada a resposta sobre a taxa de crescimento do fungo sob parâmetros de tratamento distintos como concentração e tempo de incubação do fotossensibilizador e associação com surfactante Dodecil Sulfato de Sódio (SDS). Para as hifas, com a combinação do SDS 0,05% e PDZ obtivemos uma taxa de inibição de 98% do crescimento para 2 sessões de TFDa na fase clara e 72% de inibição no protocolo de 1 sessão para a fase escura. No estudo em conídio observamos a redução de 1,7 log₁₀ do crescimento. Nos estudos anteriores, a TFDa mostrou potencial antimicrobiano no estudo in vitro do *R. oryzae*. Os próximos passos para a continuidade do projeto, que serão desenvolvidos na fase inicial do doutorado, incluem otimizar o protocolo para aumento da taxa de inibição do crescimento, avaliar a resposta no modelo de biofilme e testes com outros fotossensibilizadores.

Palavras-chave: *Rhizopus oryzae*. Mucormicose. Inativação fotodinâmica.

Agência de fomento: CAPES (88887.803881/2023-00)

Referências:

- 1 RODEN, M. M. *et al.* Epidemiology and outcome of zygomycosis: a review of 929 reported cases. **Clinical Infectious Diseases**, v. 41, n. 5, p. 634-653, Sept. 2005. DOI: 10.1086/432579.
- 2 SINGH, A. K. *et al.* Mucormycosis in COVID-19: a systematic review of cases reported worldwide and in India. **Diabetes and Metabolic Syndrome**, v. 15, n. 4, p. 102146, July 2021. DOI: 10.1016/j.dsx.2021.05.019.

PG21

Confinamento de cor e geometria em teorias de Gauge na rede

MENDES, Tereza Cristina da Rocha¹; TONHON, Rafael Carlos Silva¹

tonhonr@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente projeto propõe o estudo da Cromodinâmica Quântica (QCD) e teorias relacionadas através de simulações numéricas. Mais precisamente, será considerado o caso da teoria de Yang-Mills, utilizando-se o grupo $SU(2)$. Propomos o estudo de diversos aspectos das configurações de campos de gauge na formulação de rede, tendo como objetivo abordar o problema do confinamento tanto por modelos fenomenológicos (e.g. tubos de fluxo) quanto por métodos mais formais. (1) Planejamos investigar o papel dos vórtices de centro no problema do confinamento, seguindo os resultados fornecidos pelas simulações na rede nos últimos anos. (2) Finalmente, desejamos fazer um estudo da geometria da região de Gribov através das configurações obtidas nas simulações, assim como de configurações especificamente construídas para esse fim.

Palavras-chave: Teoria de calibre na rede. Confinamento de cor. Cromodinâmica quântica

Agência de fomento: CAPES (8887.821526/2023-00)

Referências:

1 LACHINI, N. P. **Confinement, ghost sector and geometry in lattice gauge theories**. 2019. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

2 ROSA JUNIOR, D.; OXMAN, L. E.; SIMÕES, G. M. From center-vortex ensembles to the confining flux tube. **Universe**, v. 7, n. 8, p. 253-1-253-23, Aug. 2021.

PG22

First-order hyperpolarizability dispersion on chalcone-based molecules

SCIUTI, Lucas Fiocco¹; SANTOS, Carlos Henrique Domingues dos¹; PELOSI, André¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹; BONI, Leonardo De¹

lfsciuti@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

The first-order molecular hyperpolarizability (β) dispersion was measured using tunable femtosecond hyper-Rayleigh scattering (tHRS) technique in seven chalcone-based molecules. (1) A theoretical model for β dispersion based on photophysical parameters was also applied. (2) Due to the different substitution patterns of the aryl/heteroaryl rings on the chalcones structure, different profiles of one and two-photon absorption spectra and β dispersion were observed. The applied model showed two important features for aiming high β values: (i) red-shifted one-photon and two-photon absorption bands and (ii) the number of absorption bands observed. To compare the results with other molecular structures, we employed the HRS figure of merit (FOM), which revealed that chemically engineered small chalcone molecules FOM is comparable to larger quadrupolar and octupolar ones. This clearly demonstrates that tunable femtosecond hyper-Rayleigh scattering measurements and its relationship with the absorptive photophysical parameters are essential for design and characterize nonlinear optical materials.

Palavras-chave: Tunable hyper-Rayleigh scattering. Chalcone-based molecules. Two-photon absorption spectra.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 CLAYS, K.; PERSOONS, A. Hyper-Rayleigh scattering in solution. **Physical Review Letters**, v. 66, n. 23, p. 2980-2983, June 1991.

2 SCIUTI, L. F. *et al.* Modeling the first-order molecular hyperpolarizability dispersion from experimentally obtained one- and two-photon absorption. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 126, n. 14, p. 2152-2159, Apr. 2022.

PG23

Noninvasive tumor diagnostics using proteolytic activity nanosensorsZUCOLOTTO, Valtencir¹; SILVA, Erica Corina da¹

erica.corina@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Cancer diagnosis relies fairly on clinical symptoms, imaging, detection of endogenous biomarkers in blood circulation, and invasive biopsies. (1) However, cancer progresses in silence featuring confusing symptoms, lesions below the level of imaging detection, low concentration levels of clinically relevant biomarkers in biofluids, and often limited tissue for sampling, curtailing the benefits of early tumor detection. (2) To tackle it, an emerging diagnostic strategy is deploying responsive nanodevices as pro-diagnostic agents to sense molecular changes in the tumor microenvironment and generate an amplified readout in biofluids. Tailored-assembled biosensors respond to matrix metalloproteinase upregulated catalytic activity in tumor invasive regions by shedding upon activation a synthetic urinary biomarker that concentrates into the urine. (3) We synthesized nanosensors by reacting an aminated inert carrier of [8-arm-poly(ethylene oxide)]40kDa, sulfhydryl-reactive-handle-terminated crosslinker (53,4 Å) of a pegylated spacer, and cysteine-terminated substrates of matrix metalloproteinase-2, containing the substrate and the synthetic biomarker linked by a peptide bond. The nanosensor molecular assembly was confirmed by its optical properties. Toxicity studies of blood markers showed that the sensor does no harm when traveling through the bloodstream. As representative formulations of our nanosensor, fluorescent probes were synthesized and successfully activated in vitro by a protease that plays a role in tumor angiogenesis. The nanosensor and synthetic biomarker half-lives in plasma and urine revealed the potential use of our nanosensor as a pro-diagnostic agent. We are putting forward a disease diagnostic validated by a mathematical framework that details relevant aspects of our nanosensor and synthetic biomarker kinetics within the body, aiming at an informed design basis of noninvasive tumor diagnostics based on activity probes.

Palavras-chave: Nanomedicine. Biosensors. Synthetic biomarkers.**Agência de fomento:** CAPES (88887.474259/2020-0)**Referências:**

- 1 CROSBY, D. *et al.* Early detection of cancer. **Science**, v. 375, n. 6586, p. 1-11, 2022.
- 2 PASHAYAN, N.; PHAROAH, P. D. P. The challenge of early detection in cancer: tumor growth dynamics and the timing of metastasis impose limits on cancer screening. **Science**, v. 368, n. 6491, p. 489-490, 2020.
- 3 KWONG, G. *et al.* Mass-encoded synthetic biomarkers for multiplexed urinary monitoring of disease. **Nature Biotechnology**, v. 31, n. 1, p. 63-70, 2013.

PG24

Effect of dimethylamine group on the nonlinear optical properties and fluorescence enhancement of acetamide-chalcone derivatives

DE BONI, Leonardo¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹; GONÇALVES, Pablo José²; COCCA, Leandro Henrique Zucolotto²; SILVA, Daniel Luiz da³; PELOSI, André Gasparotto¹; ALVES JUNIOR, Eli Silveira Alves⁴; VALVERDE, João Victor Pereira¹; OLIVEIRA, Guilherme Roberto de²

andre.gasparotto.pelosi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP; ²Universidade Federal de Goiás - UFG; ³Universidade Federal de São Carlos - UFSCar; ⁴Universidade Federal de Goiás - UFG

Here it was studied the influence of eight peripheral groups on the photophysical and nonlinear optical properties of acetamide-chalcone derivatives. Nonlinear optical measurements such the tunable Z-Scan technique and fluorescence through multiphoton excitation (MPE) were performed in femtosecond regime. (1-2) Results revealed that the incorporation of the dimethylamine group led to large fluorescence quantum yield (71% in DMSO solution) that can be triggered by MPE, which is important for biological applications. Furthermore, dimethylamine also red-shifts the lower energy band by about 90 nm, increasing its two-photon absorption cross-section by more than 100% regarding the other studied molecules of this work. Besides, all compounds displayed two-electronic states observed through one and two-photon absorption spectroscopy and confirmed by Quantum Chemistry Calculations (QCCs). The Sum Over States approach was used to model the two-photon absorption cross section spectrum off all compounds which showed a strong dependence between the coupling of the ground state with the first excited state. (3)

Palavras-chave: Acetamide-chalcones. Two-photon cross-section. SOS model.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 SHEIK-BAHAE, M *et al.* Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v.26, n.4, p.760-769, Apr. 1990. DOI: 10.1109/3.53394.
- 2 SHEIK-BAHAE, M.; SAID, A. A.; VAN STRYLAND, E. W. High-sensitivity, single-beam n2 measurements. **Optics Letters**. v.14, p.955-957, 1989. DOI: 10.1364/OL.14.000955.
- 3 MEATH, W. J.; POWER, E. A. On the importance of permanent moments in multiphoton absorption using perturbation theory. **Journal of Physics B**. v.17, p.763-781, 1984. DOI: 10.1088/0022-3700/17/5/017.

PG25

Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicosBARBOSA, Matheus Goulart¹; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla¹

matheusgb@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A termodinâmica de buracos negros foi o primeiro campo de estudos a estabelecer uma curiosa conexão entre a termodinâmica e a teoria da relatividade geral, mostrando que equações análogas às leis da termodinâmica podiam ser obtidas em espaços-tempos contendo buracos negros. Em especial, propriedades do horizonte de eventos foram relacionadas à temperatura e à entropia do buraco negro, sendo elas a chamada gravidade superficial e a área de seções espaciais do horizonte, respectivamente. Esta analogia foi expandida, em alguns aspectos, para outros tipos de horizontes causais, como o horizonte de Rindler e horizontes cosmológicos. Tais horizontes são definidos como a fronteira das regiões em contato causal com algum observador e que sejam parte do passado deste. Com isso, se conjecturou que a termodinâmica esteja de fato embutida nas equações de Einstein e que ela possa ser exposta ao se considerar qualquer horizonte causal. Esta ideia foi então explorada de várias formas nas últimas décadas, sendo um dos resultados interessantes a correspondência entre a primeira lei da termodinâmica e as equações de Einstein em um evento qualquer do espaço-tempo, sendo obtido ao considerar hipóteses como o equilíbrio termodinâmico do horizonte causal deste evento. (1) Neste contexto, pretendemos compreender se de fato existe uma formulação termodinâmica intrínseca à relatividade geral e se ela é aplicável para horizontes causais genéricos. Na tentativa de elucidar os resultados já existentes, este projeto visa analisar a evolução temporal de um observador genérico e do universo observável definido pelo cone de luz passado correspondente. A fim de evitar problemas teleológicos de definição, toda a análise é restrita a uma região finita do interior de um espaço-tempo. Desta forma, trataremos da evolução de cones de luz passados com vértices ao longo de uma linha-de-mundo tipo-tempo e truncados ao atravessar uma superfície tipo-tempo com topologia $\mathbb{R} \times S^2$. A evolução dada pelas equações de Einstein é obtida através do formalismo de Bondi-Sachs, no qual um sistema de coordenadas especial leva a uma forma hierárquica de integração das equações de Einstein, fornecendo uma solução consideravelmente simples. (2) Este formalismo foi generalizado neste estudo para incluir tensores de energia-momento genéricos. A partir dele, é possível obter uma solução por expansão das funções presentes na métrica em torno da linha-de-mundo do observador. Os primeiros termos nesta expansão serão relacionados com a aceleração e a rotação do observador, através da equação de transporte para a base ortonormal que o acompanha. Espera-se então obter uma equação que represente o balanço de energia medido pelo observador, na qual podem surgir termos geométricos relacionados à área, por exemplo. Com isso, será estudada a possibilidade de estabelecer quantidades análogas à entropia e à temperatura relacionadas ao universo observável em questão. Usando condições de energia apropriadas, pretende-se verificar se esta entropia possui algum princípio de maximização com significado físico. Além disso, uma vez bem definido o regime clássico deste problema, será estudado se a teoria quântica de campos em espaços-tempos curvos pode fornecer generalizações das temperaturas de Hawking e de Unruh relativas ao universo observável finito proposto.

Palavras-chave: Horizontes causais. Termodinâmica de buracos negros. Formalismo de Bondi-Sachs.

Agência de fomento: CAPES (88887.499852/2020-00)

Referências:

- 1 JACOBSON, T.; PARENTANI, R. Horizon entropy. **Foundations of Physics**, v. 33, n. 2, p. 323-348, Feb. 2003.
- 2 ISAACSON, R. A.; WELLING, J. S.; WINICOUR, J. Null cone computation of gravitational radiation. **Journal of Mathematical Physics**, v. 24, n. 7, p. 1824-1834, July 1983.

PG26

Implicações do teorema de Liouville para raios cósmicos ultra energéticos

OLIVEIRA, Cainã de¹; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de¹; MAIA, Leonardo Paulo¹

caina.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Frequentemente são encontradas afirmações utilizando o teorema de Liouville no contexto de raios cósmicos e a busca por suas fontes. (1-2) Estas afirmações são feitas de modo qualitativo, e provas rigorosas são difíceis de encontrar ou muitas vezes inexistentes. Nesse trabalho apresentamos soluções da equação de Liouville para um ensemble de partículas relativísticas carregadas se propagando em campos magnéticos. Nosso interesse está em entender a evolução de multipolos do fluxo para o estudo de anisotropias de raios cósmicos ultra energéticos. Em particular debatemos a afirmação "Uma anisotropia não pode surgir devido deflexões magnéticas de um fluxo originalmente isotrópico" encontrada em referências renomadas. (1) Mostramos que na realidade, "Uma anisotropia não pode surgir devido deflexões magnéticas de um fluxo originalmente homogêneo e isotrópico". Além disso, o formalismo desenvolvido é utilizado em análises da dependência da amplitude do dipolo com a energia, medido pelo Observatório Pierre Auger; e em predições do sinal de quadrupolo. (3)

Palavras-chave: Raios cósmicos ultra energéticos. Teorema de Liouville. Campos magnéticos.

Agência de fomento: FAPESP (2020/15453-4)

Referências:

- 1 AAB, A. *et al.* Observation of a large-scale anisotropy in the arrival directions of cosmic rays above 8×10^{18} eV. **Science**, v. 357, n. 6357, p. 1266-1270, 2017.
- 2 AHLERS, M.; MERTSCH, P. Origin of small-scale anisotropies in Galactic cosmic rays. **Progress in Particle and Nuclear Physics**, v. 94, p. 184-216, 2017. DOI: 10.1016/j.pnpnp.2017.01.004.
- 3 ALMEIDA, R. M. *et al.* Large-scale and multipolar anisotropies of cosmic rays detected at the Pierre Auger Observatory with energies above 4 EeV. **Proceedings of Science**, v. 395, 2022. DOI: 10.22323/1.395.0335.

PG27

Novas técnicas experimentais para discriminação de diferentes efeitos ópticos não lineares refrativos

MOYSÉS, Renato Mafrá¹; MISOGUTI, Lino¹

renatomaframoyes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Neste trabalho, foi proposto pela primeira vez a aplicação conjunta de três técnicas de medida de refração não linear: Varredura-Z Resolvida em Polarização (VZRP). (1) Varredura-Z Heterodina Resolvida em Polarização (VZHRP) e Rotação Não Linear da Polarização Elíptica (RNLPE) para investigar, distinguir e quantificar três tipos de efeitos não lineares: eletrônico não ressonante, orientação molecular e térmico. A grande contribuição deste trabalho foi a detecção e a discriminação destes três efeitos pelas técnicas de VZRP e VZHRP, mesmo quando estes ocorrem simultaneamente. Grosso modo, nestas duas técnicas, a polarização do laser (linear e circular) discrimina os dois efeitos não lineares rápidos, enquanto que o efeito térmico lento é determinado pela realização de medidas em função da taxa de repetição do laser, na primeira técnica, e pela detecção heterodina, na segunda. Por outro lado, medidas de RNLPE são cegas ao efeito térmico e, portanto, fornecem resultados complementares das não linearidades eletrônica e orientacional. (2) É utilizado o sistema laser Carbide (Light Conversion) de pulsos de 200 femtossegundos em 515 nm, com taxa de repetição variável e alta (até 1 MHz) para realização de medidas em dissulfeto de carbono (CS₂) puro e contaminado, de maneira a calibrar e testar a viabilidade das técnicas propostas. Neste caso, os pulsos ultracurtos de altas intensidades excitam as não linearidades rápidas, eletrônica e orientacional, e, simultaneamente, o efeito térmico lento cumulativo, devido à alta taxa de repetição do laser. Este solvente foi escolhido por causa de suas conhecidas altas não linearidades e por ser bastante estudado na literatura. (3) Além do solvente puro, que apresentou efeito térmico proveniente de absorção de dois fótons (A₂F), foi caracterizado CS₂ contaminado com corante Disperse Red 13 (DR13), por causa do seu alto efeito térmico devido à forte absorção linear em 515 nm. Em suma, foi possível verificar que os resultados obtidos pelas técnicas são confiáveis e, desta forma, acredita-se que elas possam ser aplicadas para detectar e discriminar diferentes efeitos não lineares, mesmo que ocorram misturados, em muitos materiais.

Palavras-chave: Óptica não linear. Pulsos ultracurtos. Discriminação de efeitos refrativos.

Agência de fomento: CNPq (162028/2021-0)

Referências:

- 1 MOYSÉS, R. M.; BARBANO, E. C.; MISOGUTI, L. Discrimination of thermal, molecular orientation, and pure electronic refractive nonlinearities using the polarization-resolved Z-scan technique. **Journal of the Optical Society of America B**, v. 40, n. 4, p. C60-C66, 2023. DOI: 10.1364/JOSAB.482486.
- 2 MIGUEZ, M. L. *et al.* Measurement of third-order nonlinearities in selected solvents as a function of

the pulse width. **Optics Express**, v. 25, n. 4, p. 3553-3565, 2017. DOI: 10.1364/OE.25.003553.

3 REICHERT, M. *et al.* Temporal, spectral, and polarization dependence of the nonlinear optical response of carbon disulfide. **Optica**, v. 1, n. 6, p. 436-445, 2014. DOI: 10.1364/OPTICA.1.000436.

PG28

Two-photon absorption and dynamics of excited states in Bromo-Chalcone derivatives

MENDONCA, Cleber Renato¹; VALVERDE, João Victor¹; MARUCCI, Nathan Barbola¹

nathanbarbola@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Abstract: Chalcones are a family of organic compounds that exhibit good nonlinear optical properties. (1) Additionally, they have a relatively simple synthesis and various pharmacological properties, making them promising subjects of study, with potential applications in areas such as bio-photonics. (2) In this work we study the dynamics of excited states and the effect of substituents (electron donors and acceptors) on the two-photon absorption (2PA) cross-section of bromo-chalcone derivatives using the z-scan technique. (3) Nonlinear optical experiments are performed using 200-fs pulses from a YGW laser system, which, when coupled with an optical parametric amplifier, allows for tuning the excitation wavelength from the UV to the near-infrared. Therefore, the 2PA cross-section spectrum is obtained, enabling to correlate the nonlinear optical response with the molecular structure. Initially we have selected a few chalcone compounds, which were diluted in DMSO, and their linear absorption and fluorescence spectra have been measured. It was observed that the samples exhibited two UV absorption bands, except for the one with the amino group (-NH₂), which showed a significant shift of the first band (now centered at 432 nm). Such a molecule was also the only one that exhibited fluorescence, centered at 558 nm. Yet, from the open aperture (absorptive) z-scan measurements with this sample, it was observed that the transitions allowed by one photon were also allowed by two photons, which is a characteristic of a non-centrosymmetric molecule. Further studies are being performed with the other chalcone compounds to correlate the nonlinear spectrum and specific molecular features.

Palavras-chave: Two-photon absorption. Bromo-chalcone derivatives. Z-scan.

Agência de fomento: CAPES (88887.803863/2023-00)

Referências:

- 1 ARSHAD, M. N. *et al.* Synthesis, crystal structures, spectroscopic and nonlinear optical properties of chalcone derivatives: a combined experimental and theoretical study. **Journal of Molecular Structure**, v. 1141, p. 143-156, Aug. 2017. DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.03.090.
- 2 SALEHI, B. *et al.* Pharmacological properties of chalcones: a review of preclinical including molecular mechanisms and clinical evidence. **Frontiers in Pharmacology**, v. 11, p. 592654-1-592654-21, Jan. 2021. DOI: 10.3389/fphar.2020.592654.
- 3 SHEIK-BAHAE, M. *et al.* Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, p. 760-769, Apr. 1990.

PG29

Reposicionamento farmacêutico do fármaco antiviral Aciclovir: novos sais farmacêuticos

SANTIAGO, Pedro Henrique de Oliveira¹; SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da¹; ELLENA, Javier Alcides²; NUNES, Paulo¹

paulo.ns@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade de São Paulo

Reposicionamento farmacêutico é uma excelente estratégia que oferece vantagens sobre o desenvolvimento tradicional de medicamentos, uma vez que a descoberta de drogas é um processo caro, demorado e altamente arriscado. Particularmente, com o surgimento do novo coronavírus (Sars-CoV-2), declarado pela Organização Mundial de Saúde como patologia pandêmica, surgiu uma enorme necessidade de desenvolver agentes terapêuticos capazes de combater sua infecção. Concomitantemente, fármacos conhecidos e já comercializados, como o Aciclovir (ACV), foram testados para o tratamento contra a COVID-19. ACV é uma droga antiviral bem conhecida, análoga de guanosina, comumente usada para tratar o vírus herpes simplex (HSV), herpes genital e vírus varicela zoster (VZV). O ACV mostrou inibir proteases virais como a Mpro associada ao Sars-CoV-2, ajudando na recuperação de pacientes COVID-19. (1-3) No entanto, o ACV é uma droga classe III/IV da Sistema de Classificação Biofarmacêutico (SCB), com baixa solubilidade aquosa e/ou permeabilidade. Visando melhorar as propriedades farmacocinéticas do ACV, neste trabalho são apresentados dois novos sais inorgânicos com esta do fármaco (nitrato e sulfato), com solubilidade aprimorada. Os novos sais foram avaliados por análises térmicas, espectroscópicas e difração de raios-X.

Palavras-chave: Reposicionamento Farmacêutico. Engenharia de Cristais.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 O'BRIEN, J.J.; CAMPOLI-RICHARDS, D.M. Acyclovir: an updated review of its antiviral activity, pharmacokinetic properties and therapeutic efficacy. **Drugs**, v.37, n.3, p. 233–309. 1989.
- 2 KUMAR, D. *et al.* **Promising acyclovir and its derivatives to inhibit the protease of SARS-CoV-2: molecular docking and molecular dynamics simulations.** 2020. DOI: 10.21203/rs.3.rs-94864/v1.
- 3 BAKER, V. S. Acyclovir for SARS-COV-2: an old drug with a new therapeutic purpose-an observational study. **International Journal of Clinical Case Reports and Reviews**, v. 10, n.2, p. 0199-1-0199-7, 2022.

PG30

On the nature of the black hole information problem

BERNARDES, Esmerindo de Sousa¹; BERGAMASCHI, Thiago Torres¹

tbergamaschi@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

More than a century after its creation, general relativity is the most successful theory to describe gravitational phenomena at the classical level. Given its grandeur, it is even possible to study quantum effects in gravitation by considering quantum field theory in a curved spacetime background. However, although many developments have been made in the study of such effects, a satisfactory theory of quantum gravity is still an open question. One of the most intriguing aspects of these developments is the black hole information problem: a question about the final state of a black hole in light of its evaporation process, as predicted by the emission of particles with perfect thermal character. (1) In other words, one would like to understand if the information is really lost in the process of black hole evaporation, or how this inadequate conclusion can be used to construct an adequate theory of gravitation. (2) The goal of this work is to present the information problem and to consider, from a critical perspective, which concepts of general relativity, quantum field theory, and thermodynamics are minimally necessary for its formulation. First, we have reviewed the elements of general relativity necessary for the study of black holes and the information problem. Second, within this framework, we analyzed the classical aspects of black holes and the concepts of their formation in physically reliable spacetimes. Such an analysis was made by representing a black hole as a region with no escape, whose internal evolution does not affect the rest of spacetime, i.e., the outer region is causally and deterministically “well behaved”. To make such a description precise, we used the fact that, at sufficiently late times, the black hole is uniquely described by three parameters, its mass, angular momentum, and electric charge, which give rise to the uniqueness of the Kerr-Newman metric. (3) Third, following this description, we have used the symmetries of the spacetime, described the black hole boundary as a null geodesic congruence and considerations of the cosmic censor conjecture to derive several properties that are rigorous results of differential geometry. Currently, we are deriving relevant quantum effects using the formalism of quantum field theory in curved spacetime. At the same time, we are discussing how the assumptions used to derive the classical properties have to be interpreted in the light of quantum effects. This will finally enable us to discuss the relationship between the properties of black holes and thermodynamics, and thus to present the information problem.

Palavras-chave: Black holes. Quantum field theory in curve spacetime. Information problem.

Agência de fomento: CAPES (88887.670913/2022-00)

Referências:

1 WALD, R. M. The thermodynamics of black holes. **Living Reviews in Relativity**, v. 4, n. 1, p. 6, July 2001.

2 UNRUH, W. G.; WALD, R. M. Information Loss. **Reports on Progress in Physics**, v. 80, n. 9, p. 092002, July 2017.

3 HEUSLER, M. **Black hole uniqueness theorems**. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.

PG31

Reconhecimento de minérios de ferro por aprendizagem de máquina

QUEIROZ, Alfredo Antonio Alencar Exposito de¹; ANDRADE, Marcelo Barbosa de¹

alfredo.queiroz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Em vários objetos usados no cotidiano há a presença de minerais, uma vez que estes servem de matéria prima, como no caso dos veículos que usam o ferro para sua produção. Há alguns anos, o minério de ferro brasileiro tem atendido as altas demandas de siderúrgicas internacionais. Apesar da demanda pelo minério ter diminuído para alguns países e o preço da commodity ser menor em comparação com o último ano, ainda é estimado que a produção de milhões de toneladas desse minério irá propiciar uma arrecadação da ordem de bilhões de dólares. (1) A produção de altas quantidades do minério promove a procura de novos depósitos e o desenvolvimento de novas técnicas que permitam identificar e caracterizar os minerais mais rapidamente. As técnicas precisam considerar a variação de composição química e o polimorfismo estrutural, como ocorre em minérios de ferro. (2) Como exemplos podem ser citados a hematita (Fe_2O_3), maghemita ($(Fe_{0.67}^{3+} \square_{0.33})Fe_2^{3+}O_4$) e magnetita ($Fe^{2+}Fe_2^{3+}O_4$): as duas primeiras possuem composição química semelhante, mas possuem estruturas cristalinas diferentes. Ao contrário da magnetita e maghemita que possuem a mesma estrutura cristalina. Neste trabalho, utilizaram-se as técnicas de espectroscopia Raman, difração de raios X e a energia dispersiva de raios X para a identificação e caracterização das amostras de minerais de ferro. Os espectros Raman foram utilizados junto com métodos de aprendizado de máquina supervisionados para a classificação de espécies minerais, uma vez que os óxidos de ferro apresentam modos vibracionais Raman que são sensíveis a alterações estruturais e de composição química. (3) O trabalho se foca no uso de diferentes métodos de aprendizagem de máquina, como o uso de vizinhos próximos e aprendizagens profundas. A classificação foi feita de acordo com os deslocamentos Raman presentes nos espectros.

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

Agência de fomento: CAPES (88887.370250/2019-00)

Referências:

1 IBRAM. **Desempenho da mineração tem queda em 2022, mas setor cria mais empregos e aumentará investimentos para US\$ 50 bi até 2027.** 2023. Disponível em: <https://ibram.org.br/noticia/desempenho-da-mineracao-tem-queda-em-2022-mas-setor-cria-mais-empregos-e-aumentara-para-us-50-bi-ate-2027/>. Acesso em: 28 jun. 2023.

2 TUCEK, J. *et al.* Zeta-Fe₂O₃ - a new stable polymorph in iron(III) oxide family. **Scientific Reports**, v. 5, p. 1-11, 2015. DOI: 10.1038/srep15091.

3 FARIA, D. L.; SILVA, S. V.; OLIVEIRA, M. T. Raman microspectroscopy of some iron oxides and

oxyhydroxides. **Journal of Raman spectroscopy**, v. 28, n. 11, p. 873-878, 1997.

PG32

Benchmarking variational quantum eigensolvers for detection of many-body Hamiltonian entangled ground state

FERREIRA, Pedro Coutinho Azado¹; DRINKO, Alexandre¹; CORRER, Guilherme Ilário¹; MEDINA, Ivan¹; PINTO, Diogo de Oliveira Soares¹

adrinko@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Variational quantum algorithms (VQA) has emerged in recent years as a promise to obtain quantum advantage in Noisy Intermediate Scale Quantum (NISQ) devices and processes. These task-oriented algorithms work in a hybrid loop where a quantum processor runs a parametrized quantum circuit and its outputs are evaluated on a classical computer. (1) The outputs guide the optimization process of the circuit parameters to reach the minimum value of the cost function where the solution for the studied problem is encoded. Variational quantum eigensolvers (VQE) are VQA systems where the cost function minimization gives the Hamiltonian ground state or spectra. (2) Using the VQEs we choose some parametrized quantum circuits to benchmark them at entangled ground state detection for many-body systems described by Heisenberg Hamiltonian. Due to the existence of entangled ground state of the Hamiltonian, there is a set of entangled states that could be detectable using an energy-based entanglement witness. (3) Circuits with gates inspired in the Hamiltonian interactions presented faster cost function convergence than circuits where the Hamiltonian doesn't guide the gate selection.

Palavras-chave: Variational quantum algorithm. Entanglement. Quantum circuits.

Agência de fomento: CAPES (88887.601508/2021-00)

Referências:

- 1 CEREZO, M. *et al.* Variational quantum algorithms. **Nature Reviews Physics**, v. 3, n. 9, p. 625-644, 2021.
- 2 TILLY, J. *et al.* The variational quantum eigensolver: a review of methods and best practices. **Physics Reports**, v. 986, p. 1-128, 2022. DOI: 10.1016/j.physrep.2022.08.003.
- 3 DOWLING, M. R.; DOHERTY, A. C.; BARTLETT, S. D. Energy as an entanglement witness for quantum many-body systems. **Physical Review A**, v. 70, n. 6, p. 062113, 2004.

PG33

Incorporation of niobium into photonic glasses: new structure/function relations uncovered by advanced magnetic resonance techniques

HERNÁNDEZ, Laureano Javier Ensuncho¹; BRADTMÜELLER, Henrik²; ECKERT, Hellmut¹

laureanoensuncho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP; ²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

While niobium-containing oxide glass are used in several technological applications, especially for high-resolution augmented reality devices, the exact structural role of niobium (Nb), which can serve either as a network modifier or as a network former, in these glasses is still ill-understood. Solid-state nuclear magnetic resonance (NMR) has been proven to be a powerful tool for structural elucidation of glasses, due to its element-selectivity, inherently quantitative character, and its focus on local order. (1) From the NMR point of view, Nb features one of the most NMR-sensitive nuclei (⁹³Nb) which is 100% natural abundant. Nevertheless, it suffers from a large nuclear quadrupolar moment, and the ⁹³Nb NMR spectra are dominated by strong quadrupolar interactions, resulting in excessive line broadening and poor resolution. These challenges can be addressed by techniques involving fast Magic angle spinning (MAS), wideband excitation methods and dipolar recoupling techniques. (2) Here, we report results on glasses from the structurally more simple niobium phosphate glasses in the system $xNb_2O_5 - (1 - x)NaPO_3$. Advanced NMR experiments have been used to characterize the local environments of sodium, phosphorus and niobium with the aim of obtaining new structural insight towards the development of new structure-function correlations. As first results, ⁹³Nb MAS NMR and Raman spectroscopy suggest that Nb is pentavalent and six-coordinated.

Palavras-chave: NMR. Phosphate glass. Niobium

Agência de fomento: FAPESP (2022/01937-5)

Referências:

- 1 ZHANG, R. *et al.* Structural studies of Bi₂O₃–NaPO₃ glasses by solid state nuclear magnetic resonance and x-ray photoelectron spectroscopy. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 121, n. 18, p. 10087-10094, 2017.
- 2 KOPPE, J.; HANSEN, M. R. Minimizing lineshape distortions in static ultra-wideline nuclear magnetic resonance of half-integer spin quadrupolar nuclei. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 124, n. 21, p. 4314-4321, 2020.

PG34

Dinâmica de fluídos computacional paciente-específica em artérias cerebrais saudáveis: uma análise utilizando arterial spin labelingSOLCIA, Gustavo¹; SUZUKI, Yuriko²; PAIVA, Fernando Fernandes¹

gustavo.solcia@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP; ²FMRIB - University of Oxford

A dinâmica de fluídos computacional (DFC) é amplamente utilizada em pesquisas de biomecânica e medicina para estudar o sistema cardiovascular. Apesar que as imagens de ressonância magnética (IRM) podem prover informações paciente-específicas para simulações, combinar DFC e IRM ainda é um desafio. *Arterial spin labeling* é uma técnica que permite a estimativa de perfusão sanguínea cerebral (PSC). Recentemente, a PSC está sendo explorada em DFC para a estimativa de parâmetros ou validação de resultados. (1) O propósito deste trabalho é de realizar simulações utilizando IRM em artérias cerebrais saudáveis para comparação com valores de PSC derivados de imagens de ASL. As imagens de IRM foram adquiridas de um único sujeito saudável em um *scanner* Siemens Prisma de 3T (Siemens Healthineers, Erlangen, Alemanha). Utilizando o software *SimVascular*, modelamos a anatomia arterial com uma imagem angiográfica de *time-of-flight* (TOF). (2) Um fluxo sanguíneo médio foi calculado com *2D phase-contrast* (2D-PC) na região do pescoço e serviu como condição de contorno de entrada. Para os demais contornos consideramos uma resistência total satisfazendo $P=RQ$ e a lei de Murray para a divisão de resistências. Finalmente, com o ASL comparamos a divisão de perfusão da região anatômica denominada como círculo de Willis através de um atlas de território vascular. As simulações foram computadas utilizando o *SimVascular supercomputing gateway*. (3) As divisões de fluxo mais similares foram observadas nas regiões das artérias cerebrais anteriores e posteriores. Entretanto, as regiões da artéria cerebelar e da artéria cerebral média apresentaram uma diferença, respectivamente, superestimando e subestimando os valores de PSC. Uma possível razão para essas diferenças pode ser explicada por uma restrição de modelagem ao redor de regiões proximais no círculo de Willis, mais especificamente na artéria superior cerebelar esquerda e na artéria de comunicação posterior esquerda.

Palavras-chave: CFD. MRI. ASL.**Agência de fomento:** CAPES (88887.476130/2020-00)**Referências:**

- 1 SHEFFIELD, P. J. *et al.* 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. DOI: 10.1074/jbc.M209701200.
- 2 MENDONÇA, D. C. *et al.* An atomic model for the human septin hexamer by cryo-EM. **Journal of Molecular Biology**, v. 433, n. 15, p. 167096-1 - 167096-16, 2021. DOI: 10.1016/j.jmb.2021.167096.

3 CASTRO, D. K. S. V. *et al.* A complete compendium of crystal structures for the human SEPT3 subgroup reveals functional plasticity at a specific septin interface. **Journal from the International Union of Crystallography**. v. 7, p. 462–479, 2020. DOI: 10.1107/S2052252520002973.

PG35

Análise da influência de diferentes grupos periféricos na absorção multifotônica em imidazopiridinas sulfonadas

VALVERDE, João Victor¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹; DE BONI, Leonardo¹; CAMPOS, Gabriel de Oliveira¹

gabrielcampos@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com aplicações que vão desde o monitoramento de processos biológicos através de sondas fluorescentes até o bioimageamento via microscopia de fluorescência por absorção de dois fótons, os compostos orgânicos ganharam alta relevância dentro das pesquisas em fotônica, bem como suas caracterizações ópticas lineares e não lineares. Em particular, moléculas derivadas das imidazopiridinas demonstraram-se ser excelente candidatas para aplicações em biologia e medicina devido o grande escopo de propriedades ópticas geradas pela alta deslocalização de elétrons e a formação de tautômeros nos estados excitados. (1-2) Nesse ínterim, o projeto aqui exposto buscará avaliar as características absorptivas lineares e não lineares de um conjunto de imidazopiridinas sulfonadas, bem como a dinâmica de seus estados excitados, considerando as possíveis contribuições de diferentes grupos periféricos nesses comportamentos. Para tal caracterização, serão realizados os experimentos de espectroscopia UV-Vis, fluorimetria, Varredura-z e Pump-probe. Resultados obtidos até o presente momento para as características ópticas lineares dessas moléculas revelam o aparecimento de fluorescência e absorção linear entre a região final do ultravioleta e o início espectro visível, possibilitando a determinação de parâmetros experimentais que servirão de base para a análise da resposta absorptiva não linear desses compostos.

Palavras-chave: Imidazopiridinas. Não linearidades. Absorção multifotônica.

Agência de fomento: FAPESP (2022/16848-8)

Referências:

- 1 PELOSI, A. G. **Estudo da influência de grupos aceitadores de carga na absorção de dois fótons em compostos derivados de imidazo[4,5-b]piridina**. 2022. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2022.
- 2 DASH, N. *et al.* Hydrogen bond induced twisted intramolecular charge transfer in 2-(4'-N, N-dimethylaminophenyl)imidazo[4,5-b]pyridine. **Chemical Physics Letters**, v. 460, n. 1-3, p. 119-124, 2008.

PG36

Simulating the Gamma-Ray emission signature of the central molecular zone

SOUSA, Davi Bessa de¹; VIANA, Aion da Escóssia Melo¹

davibessa@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The Galactic Center (GC) represents a remarkably intricate and diverse celestial region, hosting numerous sources of cosmic-ray acceleration and non-thermal high-energy emission. Notably, a recent breakthrough has been made with the identification of a cosmic Pevatron, associated with the central supermassive black hole known as Sagittarius A*. (1) Adjacent to the GC lies the Central Molecular Zone (CMZ), an expansive expanse spanning 600 parsecs within our Galaxy's inner regions, consisting of vast, high-density giant molecular clouds. The interaction between the high-energy cosmic rays accelerated by this Pevatron and the surrounding molecular clouds can yield substantial gamma-ray emissions through pion production and subsequent decay. To comprehensively interpret the observed gamma-ray emissions from the GC, it becomes imperative to grasp the various models pertaining to the CMZ's density distribution along the line of sight. Consequently, our study focuses on constructing radiative models capable of elucidating the gamma-ray emissions from the GC as detected by gamma-ray telescopes. By employing simulations, we evaluate the gamma-ray flux received on Earth using distinct models for cosmic-ray source and propagation, along with multiple models defining the 3D geometry of the CMZ. (2) Finally, we compare our findings with data obtained from the H.E.S.S. telescope to ascertain the validity and effectiveness of our models.

Palavras-chave: Centro Galáctico. Astrofísica de altas energias. Radiação não-térmica.

Agência de fomento: FAPESP (2022/04119-1)

Referências:

- 1 HESS Collaboration *et al.* Acceleration of petaelectronvolt protons in the Galactic Centre. **Nature**, v. 531, n. 7595, p. 476-479, 2016.
- 2 AHARONIAN, F. A.; ATOYAN, A. M. On the emissivity of π^0 -decay gamma radiation in the vicinity of accelerators of galactic cosmic rays. **Astronomy and Astrophysics**, v. 309, p. 917-928, 1996.

PG37

Otimização de buscas indiretas de matéria escura com o Cherenkov Telescope Array CTA.

SOUZA FILHO, Luiz Vitor de¹; MAMPRIM, Júlia Gouvêa¹

juliagouveamamprim@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A natureza da matéria escura (DM) tornou-se um dos mistérios mais atraentes da física de partículas e da astrofísica e cosmologia. Neste projeto, propomos investigar o potencial do Telescópio Cherenkov Array (CTA) para a detecção indireta de DM a partir de um sinal de raios gama produzido pela aniquilação ou decaimento das partículas de matéria escura. (1) Existem dois alvos astrofísicos que despertam grande interesse quando se trata da detecção indireta de DM: o Centro Galáctico (GC) e as Galáxias Anãs. Sobre o primeiro, devido à sua alta densidade de matéria escura e relativa proximidade, espera-se que seja a fonte mais brilhante de raios gama do céu resultantes da aniquilação ou decaimento de matéria escura. Assim, é necessário investigar o GC como um alvo promissor para a detecção indireta de DM. No entanto, também é essencial considerar o forte ruído de fundo de outras fontes astrofísicas nesta região. (2) Portanto, este projeto concentra-se na modelagem astrofísica do sinal de DM e de fundos no GC. O principal objetivo será o desenvolvimento de métodos e técnicas para desvendar as fontes que se sobrepõem lá, a fim de detectar e caracterizar a componente de DM. Neste projeto, utilizaremos o software *gammapy* a fim de calcular o fluxo esperado de raios gama provenientes de aniquilação de matéria escura na região do Centro Galáctico para diferentes canais. (3) Também visamos calcular o J-factor para o GC e a sensibilidade esperada para a configuração de telescópios inicial do CTA. A ideia é encontrar o método ideal que será usado com o CTA quando os dados estiverem disponíveis, além de obter resultados que possam melhorar as restrições no espaço de parâmetros para um ou mais modelos de matéria escura.

Palavras-chave: Matéria escura. CTA. Raios gama.

Agência de fomento: FAPESP (2022/16842-0)

Referências:

- 1 ACHARYA, B. S. *et al.* **Science with the cherenkov telescope array**. 2017. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1709.07997.pdf>. Acesso em: 30 jun. 2023.
- 2 ACKERMANN, M. *et al.* The Fermi Galactic Center GeV excess and implications for dark matter. **Astrophysical Journal**, v. 840, n. 1, p. 43, 2017.
- 3 DEIL, C. *et al.* **Gammapy-A prototype for the CTA science tools**. 2017. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1709.01751.pdf>. Acesso em: 30 jun. 2023.

PG38

Resposta ao tratamento do câncer de pele não-melanoma com Terapia Fotodinâmica em camundongos com alterações metabólicas

MELO, Nicolás Junhiti¹; INADA, Natalia Mayumi¹

nicolas.junhiti.melo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O tratamento do câncer continua sendo um enorme desafio de saúde global e considerando as limitações de técnicas tradicionais como a quimioterapia, a pesquisa em terapia fotodinâmica (TFD) mostra que a técnica possui vantagens pelo reduzido risco de efeitos colaterais com seletividade pelas células tumorais. Dentre os tipos de câncer, o de pele não-melanoma é um dos mais comuns na população e seu tratamento com TFD já é bem relatado na literatura. (1) Apesar da comprovada eficiência da TFD, ainda não há registros da eficácia da técnica em pacientes com alterações metabólicas como a diabetes. (2) Desta forma, o projeto investigará os efeitos do uso de TFD tópica com creme e com microagulhas na resposta ao tratamento com camundongos normais (Balb/c) e diabéticos (NOD.scid), analisando como difere a produção de protoporfirina IX (PpIX). A indução tumoral será feita a partir de uma linhagem celular A431 de carcinoma espinocelular (CEC) humano e inoculação por injeção intradérmica no flanco direito do animal. Após crescimento do tumor num volume de 15 a 25 mm³ serão conduzidos os experimentos de TFD ao aplicar as microagulhas com o precursor do PpIX, o ALA, ou com um creme aplicado topicamente, nas concentrações de 10% (creme e microagulha) ou 20% de ALA (creme). Serão testados tempos de incubação de 30, 60 e 90 minutos pré-tratamento. A irradiação será feita usando uma ponteira de sistema comercial de iluminação, o LINCE, para a entrega de fluência de 30 J/cm². A análise do dano à região tumoral será realizada com análises macroscópicas e com lâminas histológicas, realizando também biópsias para testes de respirometria.

Palavras-chave: Terapia Fotodinâmica. ALA. Carcinoma espinocelular.

Agência de fomento: CAPES (88887.803637/2023-00)

Referências:

- 1 ZHAO, B.Z; HE, Y.Y. Recent advances in the prevention and treatment of skin cancer using photodynamic therapy. **Expert Review Anticancer Therapy**, v.10, p.1797-1809, 2010. DOI: 10.1586/ERA.10.154.
- 2 CORREIA, J.H. *et al.* Photodynamic Therapy Review: principles, photosensitizers, applications, and future directions. **Pharmaceutics**, v.13, p. 1332, 2021. DOI: 10.3390/pharmaceutics13091332.

PG39

Descoberta e desenvolvimento de candidatos antivirais contra a protease NS2B-NS3pro de Zika vírus

GODOY, Andre Schutzer de¹; NOSKE, Gabriela Dias¹; DOLCI, Isabela¹; OLIVA, Glaucius¹; FERNANDES, Rafaela Sachetto¹; CIPRIANO, Lavínia¹

isabeladolci@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O vírus Zika (ZIKV) é responsável pela febre zika, uma arbovirose que se tornou um problema de saúde pública em 2015/2016, principalmente no Brasil, relacionado a casos de microcefalia e síndrome de Guillain-Barré. A falta de tratamentos específicos e vacinas disponíveis explicita a necessidade de desenvolvimento de tratamentos eficazes. (1) O domínio da protease NS3, que requer NS2B como seu co-factor, é responsável pela clivagem da poliproteína viral imatura nas proteínas NS maduras, representando assim um alvo interessante para o desenvolvimento de medicamentos. O uso de ensaios baseados em enzimas virais, como a protease de ZIKV (NS2B-NS3pro), é uma estratégia eficaz para triagem de bibliotecas de compostos em busca de inibidores. O objetivo deste trabalho é identificar e caracterizar compostos com ação anti-ZIKV. Inicialmente será feita a expressão e purificação da protease recombinante de ZIKV a partir do plasmídeo bZiPro (Addgene), em seguida será feita a avaliação em formato de triagens de alta performance de bibliotecas de compostos contra o complexo ZIKV NS2B-NS3pro, por meio de ensaios enzimáticos, este que será realizado manualmente e consistirá em medir a fluorescência obtida pela reação entre a NS2B-NS3pro e o substrato comercial BZ-NKRR-AMC (International Peptides), que resulta na liberação de 7-amino-4-metilcumarina (AMC). (2) Os compostos que inibirem o complexo serão validados em ensaios celulares com o replicon subgenômico de ZIKV, um sistema auto-replicativos nos quais os genes que codificam as proteínas estruturais do vírus são substituídos por um gene repórter, como uma luciferase, será utilizada a linhagem de células de mamíferos previamente desenvolvida pelo grupo de pesquisa, denominada BHK-21-RepZIKVIREs-Neo, que expressa o replicon subgenômico de ZIKV contendo a Renilla luciferase como proteína repórter. (3) Dessa forma, os efeitos inibitórios dos compostos na replicação do RNA viral podem ser facilmente avaliados medindo-se a redução dos sinais luminescentes ou fluorescentes.

Palavras-chave: Zika. Descoberta de drogas. Protease.

Agência de fomento: FAPESP (2022/16111-5)

Referências:

- 1 WOLFORD R. W.; SCHAEFER T. J. **Zika virus**. Treasure Island: StatPearls, 2023.
- 2 FERNANDES, R. S. *et al.* High-throughput antiviral assays to screen for inhibitors of Zika Virus replication. **Journal of Visualized Experiments**, v. 176, p. e62422,-1-e62422-11, Oct. 2021. DOI: 10.3791/62422.

3 FERNANDES, R. S. *et al.* Discovery of an imidazonaphthyridine and a riminophenazine as potent anti-Zika virus agents through a replicon-based high-throughput screening. **Virus Research**, v. 299, p. 198388-1-198388-9, July 2021. DOI: 10.1016/j.virusres.2021.198388.

PG40

Structural biology of yeast septin complexes

SALADINO, Giovanna Christe dos Reis¹; SILVA, Rafael Marques da¹; CABREJOS, Diego Antonio Leonardo¹; PEREIRA, Humberto D'Muniz¹; GARRATT, Richard Charles¹; ARAÚJO, Ana Paula Ulian de¹

giovanna.saladino@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Septins are a family of proteins closely related to small GTPases discovered by Hartwell in *Saccharomyces cerevisiae* as cell cycle elements for their ability to polymerize into long non-polar filaments at the mother bud neck. (1) In yeast, four septins are organized in octamers as [Cdc11-Cdc12-Cdc3-Cdc10-Cdc10-Cdc3-Cdc12-Cdc11]_n to form filaments, with Cdc11 being able to be substituted by another terminal subunit, Shs1. (2) Structurally, each septin subunit has three domains: a guanine nucleotide-binding domain (G domain); a C-terminal domain that is usually predicted to form coiled-coils with other subunits (C domain); and a variable N-terminal, which may interact with membrane phospholipids, particularly through an α -helix dubbed $\alpha 0$ (N domain). (3) The subunits interact with two other septins by alternating interfaces, NC and G. For this project, DNA sequences of yeast septin subunits were cloned by Gibson assembly and expressed on E. coli Rosetta(DE3). Proteins were co-expressed with their G-domain partners and purified by affinity and size-exclusion chromatography, and by ion-exchange chromatography for GTP content assays. The oligomeric state was confirmed by SEC-MALS, and protein stability by circular dichroism (CD). Crystallization assays were carried out by the sitting drop vapor diffusion method, and the diffraction patterns of harvested crystals were collected on the Sirius Synchrotron (Campinas, Brazil). Experiments were first conducted using the constructs Shs1NG-Cdc12 $\alpha 0$ G, Cdc11NG-Cdc12 $\alpha 0$ G, and Cdc3 $\alpha 0$ G-Cdc10 $\alpha 0$ GC. The two first pairs were purified as dimers, but Cdc3 $\alpha 0$ G-Cdc10 $\alpha 0$ GC was obtained as a tetramer, through the formation of a homodimeric NC interface between subunits of Cdc10 $\alpha 0$ GC. CD data also confirmed that the tetramer was the most stable of the three complexes. All of these constructions were crystallized, but had poor diffraction spectra, probably due to the flexibility of the $\alpha 0$ helix when not involved in an interface. Concomitantly, a crystal structure of another construction of Cdc3G-Cdc10G was solved, which was organized as a dimer within the crystal. Therefore, in order to obtain data on the Cdc10-Cdc10 NC interface, a new construction of Cdc3G-Cdc10 $\alpha 0$ GC was expressed and purified, again as a tetramer in solution. This construction was crystallized and generated a structure at 2.66 Å resolution through X-ray diffraction. Unlike the first structure, Cdc3G-Cdc10 $\alpha 0$ GC was organized as two dimers in the crystal asymmetric unit, allowing the visualization of a physiological NC interface between two subunits of Cdc10. Analysis of this interface has allowed a better understanding of the $\alpha 0$ helix and its function in stabilizing septin complexes. Cdc3 and Cdc10 were also bound to GTP and GDP, respectively, as expected by their catalytic activities and the GTP content assays performed. Overall, this work has allowed the first look into the structure of a central NC interface for a septin complex and, consequently, a better understanding of how yeast septin structure correlates evolutionarily to human ones. This work has been supported by FAPESP and CAPES. The author is funded by grant 2022/00125-7, São Paulo Research Foundation (FAPESP).

Palavras-chave: Septin. Crystal structure. Protein-protein interface.

Agência de fomento: FAPESP (2022/00125-7)

Referências:

- 1 HARTWELL, L. H. Genetic control of the cell division cycle in yeast. **Journal of Molecular Biology**, v. 59, n. 1, p. 183-194, July 1971. DOI: 10.1016/0022-2836(71)90420-7.
- 2 BERTIN, A. *et al.* Saccharomyces cerevisiae septins: supramolecular organization of heterooligomers and the mechanism of filament assembly. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 105, n. 24, p. 8274-8279, June 2008. DOI: 10.1073/pnas.0803330105.
- 3 FIELD, C. M. *et al.* Septins: cytoskeletal polymers or signalling gtpases?. **Trends in Cell Biology**, v. 9, n. 10, p. 387-394, Oct. 1999. DOI: 10.1016/s0962-8924(99)01632-3.

PG41

Desenvolvimento de um nanossensor fluorescente baseado em nanopartículas de hidroxiapatita para o diagnóstico da tuberculose

MACHADO, Thales Rafael¹; ZUCOLOTTI, Valtencir¹; NASCIMENTO, Isabella Sampaio do¹; TAKEUTI, Nayla Naomi Kusimoto¹

naylanaomi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A tuberculose (TB) é uma infecção causada pela *Mycobacterium tuberculosis* e transmitida por via respiratória. Segundo pesquisas recentes, os casos e as mortes pela doença aumentaram no Brasil. (1) A detecção precoce é crucial para reduzir o intervalo entre a infecção e o início do tratamento, assim como a taxa de transmissão. No entanto, a cultura do escarro, método padrão para diagnóstico da doença, é demorada (cerca de 8 semanas), podendo agravar o estado de saúde do paciente. (2) As nanopartículas de hidroxiapatita (HANPs) possuem fácil adsorção de moléculas em sua superfície e podem apresentar fotoluminescência pela manipulação de defeitos em sua estrutura. (3) A combinação de propriedades de fluorescência e a possibilidade de modificação de superfície com biomoléculas tornam as HANPs promissoras para o desenvolvimento de biossensores. Este projeto visa desenvolver um nanossensor fluorescente utilizando HANPs para a detecção do complexo CFP10/ESAT6, biomarcadores da TB. As nanopartículas foram sintetizadas seguindo o método estabelecido por Machado *et al.* [3] e funcionalizadas com polietileno imina (PEI). Em seguida, anticorpos contra CFP10/ESAT6 foram covalentemente ligados as HANPs-PEI e os sítios ativos remanescentes foram bloqueados com albumina de soro bovino. As etapas de funcionalização foram caracterizadas por espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), espalhamento de luz dinâmico (DLS), potencial zeta e fotoluminescência (FL). Mudanças significativas no tamanho, carga e nos espectros de FTIR e FL indicaram o sucesso da imobilização dos anticorpos nas HANPs. Os resultados mostraram que o nanossensor é promissor para o diagnóstico preciso, rápido e de baixo custo da TB, podendo ser utilizado em locais com poucos recursos, como uma primeira triagem de infecções ou o acompanhamento do paciente durante o tratamento.

Palavras-chave: Biossensor. Hidroxiapatita. Tuberculose.

Agência de fomento: CNPq (382396/2022-7)

Referências:

- 1 BRASIL. Ministério da Saúde. Secretaria de Vigilância em Saúde. **Tuberculose**. Brasília, DF: Ministério da Saúde, 2022. 51 p. (Boletim Epidemiológico).
- 2 TAN, Y. *et al.* An automated smear microscopy system to diagnose tuberculosis in a high-burden setting. **Clinical Microbiology and Infection**, v. 25, n. 12, p. 1553-1559, Dec. 2019.
- 3 MACHADO, T. R. *et al.* A novel approach to obtain highly intense self-activated photoluminescence

emissions in hydroxyapatite nanoparticles. **Journal of Solid State Chemistry**, v. 249, p. 64-69, May 2017.

PG42

Aplicação do índice de coincidência na descoberta de vias metabólicas co-expressas

SANTOS, João Paulo Cassucci dos¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

joao.cassucci@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Analisar dados de transcriptômica requer uma análise estatística intensiva para obter informações e conhecimento biológico úteis. Uma porção significativa destes dados é afetado por ruído aleatório ou até mesmo ruído inerente à modelagem experimental. Sem um tratamento robusto, os dados podem não ser muito bem explorados e até conclusões incorretas podem ser tiradas. Examinar a correlação entre perfis de expressão de genes é uma maneira que bioinformatas extraem informações de elementos de transcrição. No entanto, os métodos de correlação utilizados tradicionalmente possuem limitações preocupantes que precisam ser lidadas. (1) Este trabalho compara as duas medidas mais comuns de correlação, rho de Pearson e rho de Spearman, ao recentemente desenvolvido índice de coincidência, uma medida de similaridade que combina os índices de Jaccard e interioridade e os generaliza para serem aplicados a vetores contendo valores reais. (2) Nós usamos os dados experimentais de experimentos de microarray da arqueia *Halobacterium salinarum* que avaliam os efeitos sobre este organismo quando exposto a luz em um ambiente anaeróbico. O método utilizado explora as vias metabólicas co-expressas medindo as correlações entre enzimas que compartilham metabólitos e busca máximos locais usando um algoritmo de anelamento simulado. (3) Nós demonstramos que o índice de coincidência extrai vias maiores, mais compreensivas, e mais estatisticamente significativas que as medidas tradicionais de Pearson e Spearman.

Palavras-chave: Bioinformática. Biologia de sistemas. Redes complexas.

Agência de fomento: FAPESP (2022/06218-7)

Referências:

- 1 IDEKER, T. *et al.* Discovering regulatory and signalling circuits in molecular interaction networks. **Bioinformatics**, v. 18, p. S233-S240, 2020.
- 2 COSTA, L. da F. Coincidence complex networks. **Journal of Physics: Complexity**, v. 3, p. 015012-1 - 015012-18, 2022.
- 3 SCHOBER, P.; BOER, C.; SCHWARTE, L. A. Correlation coefficients. **Anesthesia & Analgesia**, v. 126, p. 1763-1768, 2018.

PG43

Expressividade e capacidade de emaranhamento em circuitos de estrutura causal indefinida

FERREIRA, Pedro Coutinho Azado¹; PINTO, Diogo de Oliveira Soares¹; DRINKO, Alexandre¹; CORRER, Guilherme Ilário¹; MEDINA, Ivan¹

pedroazado@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A escolha da estrutura dos circuitos quânticos ainda é, em boa parte, heurística, onde mesmo que seja possível encontrar circuitos planejados para problemas específicos, a tentativa e erro ainda é o principal método de criação de *ansätze*. Circuitos parametrizados são então utilizados para mitigar esse problema e a possibilidade de termos parâmetros ajustáveis faz com que esses circuitos variacionais possam alcançar uma maior região do espaço de Hilbert dos possíveis estados. (1) Para quantificar essa característica, a figura de mérito que utilizamos é a expressividade do circuito. (2) Quanto maior essa expressividade, mais uniforme é a distribuição de estados quânticos alcançados no espaço de Hilbert. Além disso, também podemos quantificar a capacidade de emaranhamento do circuito pelo cálculo da medida de Meyer-Wallach. (2) Utilizamos então essas duas medidas para fazer comparações entre circuitos que possuem estruturas causais definidas e indefinidas, através da utilização do *quantum switch*. (3) Este recurso faz com que possamos gerar a dependência da ordem das operações com o estado de um qubit em superposição, de forma que, efetivamente, tenhamos a superposição da ordem de duas operações de um circuito quântico. O objetivo do trabalho é apresentar como esse recurso influencia na expressividade e na capacidade de emaranhamento do *ansatz*, e investigar se existe uma correlação entre estrutura causal indefinida e melhor aproveitamento do espaço de Hilbert de um sistema, através do uso de circuitos quânticos parametrizados.

Palavras-chave: Circuitos variacionais. Expressividade. Quantum switch.

Agência de fomento: CNPq (160851/2021-1)

Referências:

- 1 CEREZO, M. *et al.* Variational quantum algorithms. **Nature Reviews Physics**, v. 3, p. 625-644, 2021. DOI: 10.1038/s42254-021-00348-9.
- 2 SIM, S. *et al.* Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms. **Advanced Quantum Technologies**, v. 2, p. 1900070-1 - 1900070-18. Oct. 2019. DOI: 10.1002/qute.201900070.
- 3 CHIRIBELLA, G. *et al.* Quantum computations without definite causal structure. **Physical Review A**, v. 88, n. 2, p. 022318-1 - 022318-15. Aug. 2013.

PG44

Seleção de moléculas orgânicas para estudos de óptica não-linear através da ferramenta computacional MolShaCS

INACIO, Anna Cristina Cavallari¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

anna.inacio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Um dos pilares da área de Fotônica não linear é o desenvolvimento de novas tecnologias e dispositivos e, para isso, é necessário um estudo detalhado de materiais que possam ser utilizados em novas aplicações, ou seja, que apresentem boa resposta não linear. Este trabalho propõe uma maneira de selecionar moléculas orgânicas que apresentam melhor resposta não linear e, portanto, apresentam melhor aplicabilidade tecnológica, através do uso da ferramenta computacional *MolShaCS*. (Molecular Shape and Charge Similarity), desenvolvida pelo grupo de pesquisa de biotecnologia molecular do IFSC/USP. (1) Pretendemos analisar moléculas orgânicas a partir de sua estrutura e carga, obtendo um índice de similaridade entre elas e moléculas que já tiveram seus processos não lineares bem estudados e apresentaram bom resultados. Desta forma, seria possível sugerir novas moléculas com potencial para serem aplicadas em óptica não-linear. A classificação obtida computacionalmente será avaliada através da comparação de resultados obtidos com técnicas experimentais de absorção não linear já conceituadas e comumente usadas na área de Óptica não linear.

Palavras-chave: Óptica não-linear. Moléculas orgânicas. Absorção não-linear.

Agência de fomento: CAPES (88887.803864/2023-00)

Referências:

1 DE LIMA, L. A. C. V.; NASCIMENTO, A. S. MolShaCS: a free and open source tool for ligand similarity identification based on Gaussian descriptors. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v. 59, p. 296-303, 2013. DOI: 10.1016/j.ejmech.2012.11.013.

PG45

Indirect detection of Dark Matter in dwarf galaxies with the Southern Wide-field Gamma-ray Observatory

ANDRADE, Micael Jonathan Duarte¹; VIANA, Aion da Escóssia Melo¹

micaelandrade@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Despite its overwhelming presence, dark matter, comprising approximately 85% of the universe's total matter, continues to elude detection. Indirect detection, which involve searching Standard Model particles resulting from the decay or self-annihilation of dark matter particles, represent one approach to unveil signs of dark matter. When the dark matter particles possess masses in the GeV-TeV range, the detection of γ -rays emanating from astrophysical entities densely populated with dark matter becomes a viable method of detection. (1) Among the celestial bodies, dwarf galaxies, despite not boasting the highest densities, assume significance as they are predominantly composed of dark matter and are relatively close to our planet. Particularly, dwarf spheroidal galaxies (dSphs), characterized by an aged stellar population and lack of active star formation, become invaluable since they would exhibit negligible γ -ray emissions in the absence of dark matter. The objective of this study is to predict the potential detectability of signals arising from dark matter annihilation or decay in dwarf galaxies utilizing the Southern Wide-field Gamma-ray Observatory (SWGO), a future observatory to be constructed in South America. (2) The collective observations of SWGO are shown to yield competitive constraints on dark matter within the mass range of hundreds of GeV to hundreds of TeV. (3)

Palavras-chave: Dark matter. Dwarf galaxies. SWGO.

Agência de fomento: FAPESP (2021/09744-9)

Referências:

- 1 CIRELLI, M. *et al.* PPC 4 DM ID: a poor particle physicist cookbook for dark matter indirect detection. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2011, n. 03, p. 051, 2011.
- 2 GERINGER-SAMETH, A.; KOUSHIAPPAS, S. M.; WALKER, M. Dwarf galaxy annihilation and decay emission profiles for dark matter experiments. **Astrophysical Journal**, v. 801, n. 2, p. 74, 2015.
- 3 VIANA, A. *et al.* Searching for dark matter in the galactic halo with a wide field of view TeV Gamma-ray Observatory in the Southern Hemisphere. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2019, n. 12, p. 061-1-061-16, 2019.

PG46

Quantification of Protoporphyrin IX concentration in murine pigmented melanoma by ex vivo, in situ and in vitro measurements

PRATAVIEIRA, Sebastião¹; AYALA, Erika Toneth Ponce¹

eriponce@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

PpIX is an endogenous porphyrin whose accumulation in target cells can reach sono- and photosensitizing concentrations by the exogenous application of ALA. Since a key component to trigger dynamic cytotoxic effects is the sensitizing molecule, it becomes very important to verify that the sensitizing molecule to be used for treatment is deposited in sufficient quantity in the target region. These measurements may be feasible non-invasively using imaging when the tumor is non-pigmented. However, when the tumor lesion is pigmented, the PpIX quantification measurements using fluorescence images are not accurate. So, this work aimed to assess the PpIX deposition in melanoma tumors by in vitro fluorescence measurements and chemical extraction method. (1) For this purpose, female BALB/c nude mice were inoculated with 10^6 murine melanoma cells (B16-F10) by intradermal injection on the right flank of the animal. When the tumor volume reaches $100 \pm 10 \text{ mm}^3$, animals were subjected to ALA administration following 5 different protocols: Topical administration using a cream formulation containing 20% Methyl ALA (4 UI, incubation time: 12 h), Intratumoral ALA administration (Dose: 200 mg/Kg b.w., incubation time: 2 h), and intraperitoneal ALA administration (Dose: 200 mg/Kg b.w., incubation time: 3, 4 and 5 h). The PpIX fluorescence spectra, in healthy skin and tumor region, were collected by in situ, ex vivo and in vitro measurements by Steady-state fluorescence spectroscopy. For *in vitro* measurements, tissue samples (healthy skin and tumor) were excised, homogenized, and put into 1 mL methanol for 24 h at -20°C . After this time, samples were thawed and centrifuged, and the supernatants were collected for fluorescence measurements. (2) The amount of PpIX extracted from the melanoma tumor was compared with that extracted from a non-melanoma tumor model (A431) where the PpIX synthesis was induced by a clinical protocol of ALA administration for the application of photodynamic therapy. The *In vitro* measurements showed that the intraperitoneal (3 h) and intratumoral protocols induced a greater PpIX accumulation ($0.34 \pm 0.02 \mu\text{M}$) in the tumor region than the other protocols, but it was observed a high sensitization of the healthy skin. By means of the topical protocol, it was possible to avoid the healthy region sensitization, and the PpIX concentration in the tumor ($0.11 \pm 0.01 \mu\text{M}$) was almost the same amount as that generated by the clinical protocol ($0.16 \pm 0.01 \mu\text{M}$). Unlike in vitro measurements, ex vivo measurements showed no PpIX fluorescence in the tumor. This discrepancy is due to the light absorption of the pigmented tissues, so, the direct fluorescence readings are misleading. The results suggested that a photosensitive amount of PpIX can be synthesized within the melanoma tumor by the Intratumoral, intraperitoneal (3 h), and topical protocols.

Palavras-chave: Protoporphyrin IX. 5-Aminolevulinic acid. Cutaneous melanoma.

Agência de fomento: CAPES (88887.601504/2021-00)

Referências:

- 1 JUZENAS, P. *et al.* Photosensitizing effect of protoporphyrin IX in pigmented melanoma of mice. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, v. 297, n. 3, p. 468-472, 2002.
- 2 JUZENIENE, A. *et al.* Topical application of 5-aminolevulinic acid and its Methylester, Hexylester and Octylester derivatives: considerations for cosimetry in Mouse skin model. **Photochemistry and Photobiology**, v. 76, n. 3, p. 329-334, 2002.

PG47

Development of an ultrafast pump and probe platform and its application in the characterization of photoisomerizing push-pull azobenzenes

DE BONI, Leonardo¹; GARCIA, Rafael de Queiroz¹

rafaelgarcia@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Ultrafast time-resolved spectroscopy is an essential field for characterization of materials, because it allows one to measure the dynamics of excited states and also probe different characteristics of materials on an ultrafast time scale (< 1 ns) depending of the type of light-matter interaction being employed. (1) In this work, a pump and probe setup with 150 - 220 fs time resolution and broad spectral coverage was developed. This kind of time-resolved technique relies, first, on a pump pulse to optically excite the sample. Then, a probe pulse is used to measure changes in the sample caused by the pump pulse as a function of the relative time delay between both pulses. The new setup can have pump pulses ranging from 210 nm to 3000 nm. Additionally, the probe pulses can be either produced by two OPAs at the 210 nm - 16 μ m range or by White-Light Continuum generation with a 500-1030 nm bandwidth. The first kind of probe is used together with lock-in detection, to measure signals with resolution up to around 1 μ OD. The second kind of probe is detected by a spectrometer because of its broadband nature. In this manner, the minimum resolution is worse, on the order of 1 mOD. Additionally, a new Non-collinear Optical Parametric Amplifier (NOPA) has been developed in the lab. Its output currently ranges from 640 to 1000 nm and it can possibly be second-harmonic duplicated. This new tool will allow measurements with pulses up to 18 fs to be performed. Thus, in the future, not only broad spectral coverage will be available in the setup, but also better time coverage. Furthermore, this setup was used to study four push-pull azobenzene derivatives, which are molecules that undergo photoisomerization on the excited state. (2-3) With the use of pump and probe spectroscopy, the isomerization dynamics for both isomers was shown to occur on a sub-10 ps time for both isomers. Additionally, by comparison of the four molecules, it was possible to propose two different isomerization pathways which are available for the *trans*.isomer, in contrast with only one for the *cis*.isomer. Transient absorption anisotropy measurements also show the geometrical distortions that occur during isomerization and allows the identification of a barrier in the ground state of the molecules which retards full vibrational relaxation. This was a very important finding, because it has shown that some structures on the Potential Energy Surface of the molecular states may be invisible to the most commonly used probes and the detection depends on the charge symmetry properties of the molecule. In addition, spectroscopic characterization of the *cis*.isomer was performed, which is not usually done for push-pull azobenzenes. Part of the study was developed in collaboration with Tiago Buckup, in the University of Heidelberg.

Palavras-chave: Espectroscopia ultrarrápida. Espectroscopia resolvida no tempo. Absorção transiente.

Agência de fomento: FAPESP (2020/16036-8)

Referências:

- 1 MAIURI, M.; GARAVELLI, M.; CERULLO, G. Ultrafast spectroscopy: state of the art and open challenges. **Journal of the American Chemical Society**, v. 142, n. 1, p. 3-15, 2020. DOI: 10.1021/jacs.9b10533.
- 2 JACQUART, A.; WILLIAMS, R. M.; BROUWER, A. M.; ISHOW, E. Decoupling fluorescence and photochromism in bifunctional Azo derivatives for bulk emissive structures. **Chemistry**, v. 18, n. 12, p. 3706-3720, 2012. DOI: 10.1002/chem.201103411.
- 3 LEDNEV, I. K. *et al.* Femtosecond time-resolved UV-visible absorption spectroscopy of trans-azobenzene: dependence on excitation wavelength. **Chemical Physics Letters**, v. 290, n. 1-3, p. 68-74, 1998. DOI: 10.1016/S0009-2614(98)00490-4.

PG48

Unveiling a giant molecular second harmonic generation in supramolecular compounds by a femtosecond tunable HRS technique

VIVAS, Marcelo Gonçalves¹; MENDONÇA, Cleber Renato²; SANTOS, Carlos Henrique Domingues dos²; DE BONI, Leonardo²

c.henrique@ifsc.usp.br

¹Laboratório de Espectroscopia Óptica e Fotônica - UNIFAL; ²Instituto de Física de São Carlos – USP

The high demand for new materials with enhanced optical features has led to a growing interest in molecular nonlinear optics. This area of research has facilitated the creation of more efficient materials and a decrease in the cost of recent technologies. In particular, the macromolecules have received a special attention due to their high symmetry breaking being an excellent candidate for presenting great values of second order optical susceptibility χ^2 . (1) The polybinaphthalenes have an ideal macromolecular structure to link different chromophores to optimize the nonlinear optical responses. (2) In this context, we determined the spectral dependence of the first order molecular hyperpolarizability $\beta(\lambda)$ of four donor-embedded polybinaphthalenes (DEP) structures in solution. For this, we apply the tunable femtosecond Hyper Rayleigh Scattering (HRS) technique. (3) The results show high β values for all studied macromolecules, with peak values ranging from 2500 to 16000 ($\times 10^{-30} \text{cm}^4 \text{statV}^{-1}$). Concerning the values of β for pNA molecule, the (DEP) are c.a. 25 to 160 times higher at the enhancement resonance region. This giant molecular second harmonic generation makes these class of macromolecules an exceptional candidates for photonic devices, such as, in the fabrication of highly efficient organic crystals for second harmonic generation.

Palavras-chave: First order molecular hyperpolarizability β . HRS second harmonic generation. Supramolecular.

Agência de fomento: CAPES (88887.506484/2020-00)

Referências:

- 1 KOECKELBERGHS, G. *et al.* Synthesis and properties of chiral chromophore-functionalized polybinaphthalenes for nonlinear optics: influence of chromophore concentration. **Macromolecules**, v. 36, n. 26, p. 9736-9741, 2003. DOI: 10.1021/ma0351118.
- 2 KOECKELBERGHS, G. *et al.* Donor-embedded polybinaphthalenes for nonlinear optical applications: influence of the incorporation of a double bond. **Macromolecular Rapid Communications**, v. 26, n. 11, p. 905-910, 2005. DOI: 10.1002/marc.200500022.
- 3 CLAYS, K.; PERSOONS, A. Hyper-rayleigh scattering in solution. **Physical Review Letters**, v. 66, n. 23, p. 2980-2983, 1991. DOI: 10.1103/PhysRevLett.66.2980.

PG49

Geometria e performance de circuitos quânticos de dois qubits.

HABERMANN, Gustavo¹; SOARES-PINTO, Diogo¹

gustavohabermann@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O desenvolvimento de computadores quânticos promete ser a solução para diversas aplicações, como simulação de sistemas quânticos ou resolução de problemas de álgebra linear de grande escala, cujo custo computacional excede a capacidade dos mais poderosos computadores clássicos. O estudo de circuitos quânticos parametrizados (PQC's) vem sendo um importante ponto de discussão no desenvolvimento dos chamados *Variational Quantum Algorithms* (VQAs), que integram computadores quânticos com técnicas de otimização clássicas (similares a machine learning) para encontrar soluções de maneira computacionalmente eficiente para os problemas citados anteriormente. Com o intuito de melhor entender como a escolha de circuito parametrizado se relaciona com a performance dos VQAs podemos adotar uma abordagem geométrica, investigando a geometria gerada pelos circuitos parametrizados. Neste trabalho vamos nos restringir ao caso de circuitos de dois *qubits*. Este caso específico, ainda que limitado, tem uma geometria bastante rica. Iniciamos o estudo com uma descrição geométrica do espaço de estados de um sistema de dois *qubits*. Evidenciando sua compatibilidade com a estrutura de fibrado de Hopf, especificamente, o fibrado $S^3 \hookrightarrow S^7 \rightarrow S^4$ (1). A partir da estrutura de fibrado é possível verificar que surge naturalmente uma interpretação geométrica do emaranhamento, quantificado pela concorrência, relacionando-o a curvatura escalar (escalar de Ricci) do espaço de estados sob a métrica de Fubini-Study. (1) Este resultado nos permite investigar o ganho de performance obtido quando se faz uso do chamado *Natural gradient descent* como algoritmo de otimização no lugar de algoritmos de descida de gradiente usuais. (2) Utilizando de ferramentas da geometria de informação, podemos explicar o ganho de performance, além de outras vantagens, como a invariância por reparametrização, associadas ao *Natural gradient descent* através da métrica de informação de Fisher e sua relação com a métrica de Fubini-Study, a métrica natural do espaço de estados quânticos puros.

Palavras-chave: Informação quântica. Computação quântica.**Agência de fomento:** CAPES (88887.702987/2022-00)**Referências:**

- 1 LEVAY, P. The geometry of entanglement: metrics, connections and the geometric phase. **Journal of Physics A: general physics**, 2003. DOI: 37.10.1088/0305-4470/37/5/024.
- 2 KATABARWA, A. *et al.* Connecting geometry and performance of two-qubit parameterized quantum circuits. **Quantum**, v. 6, p. 782, 2022. DOI: 10.22331/q-2022-08-23-782.

PG50

Desvendando a Interação entre as Septinas Humanas e a Toxina Botulínica

ARAUJO, Ana¹; CAVINI, Italo Augusto¹; MAMANI, Eloy Condori¹

eloy.cm@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

As neurotoxinas botulínicas (BoNT) são toxinas potentes que podem levar a sintomas graves de botulismo, mas que também têm sido utilizadas com sucesso no tratamento de distúrbios neurológicos e terapias cosméticas. Os efeitos terapêuticos do tipo A da BoNT (BoNT/A) duram de 3 a 12 meses. No entanto, os mecanismos que governam a ação de longa duração da BoNT/A nas células neuronais são pouco compreendidos. De fato, a estabilização da cadeia leve da BoNT/A (LCA) pode ser resultado de sua ligação física a proteínas citoesqueléticas relativamente estáveis, como septinas, mas uma interação direta entre elas ainda não foi demonstrada. (1-2) O objetivo deste trabalho é centrado em produzir tanto a LCA quanto septinas humanas recombinantes, a fim de determinar e caracterizar a potencial interação. Para isto, a expressão das proteínas foi realizada em células *E. coli* Rosetta (DE3). A LCA foi expressa em fusão com GST (GST-LCA) e a SEPT7 com uma His-tag. Assim, após a purificação das proteínas, a interação pode ser avaliada por ensaios de pulldown. A GST-LCA imobilizada na resina de afinidade foi capaz de resgatar o complexo SEPT2-6-7, demonstrando de fato a interação *in vitro* entre as proteínas. Para melhor definir qual as regiões envolvidas na interação, foram produzidas construções truncadas de todas as proteínas. Os resultados dos ensaios usando o complexo SEPT2-6-7 Δ C (destituído dos domínios C terminais) não resgataram a LCA. Porém, o complexo SEPT2 Δ C-6-7 (excluindo apenas o C-terminal de SEPT2) foi capaz de resgatar a LCA. Assim, pode ser determinado que os C terminais são as regiões responsáveis pela interação com a LCA, mas que apenas SEPT6 e SEPT7 estão envolvidas. Para definir melhor a região específica de interação, construções utilizando apenas os C terminais de SEPT6 e SEPT7 foram produzidas e estão sendo ensaiadas para avaliar a afinidade da interação septina-LCA. Em conjunto, os resultados demonstraram, pela primeira vez, uma interação direta da LCA com o complexo hexamérico formado por SEPT2-6-7 e dependente da presença dos domínios C-terminais de SEPT6 e SEPT7. Este trabalho está sendo apoiado pela CAPES e FAPESP (2020/02897-1).

Palavras-chave: Septina. BoNT/A. Interação proteína-proteína.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

- 1 CAVINI, I. A., *et al.* The structural biology of septins and their filaments: an update. **Frontiers in Cell and Developmental Biology**, v. 9, p. 765085, 2021. DOI: 10.3389/fcell.2021.765085.
- 2 VAGIN, O. *et al.* Recruitment of septin cytoskeletal proteins by botulinum toxin A protease determines its remarkable stability. **Journal of Cell Science**, v. 127, n. 15, p. 3294-3308, 2014.

PG51

Desenvolvimento de imunossensor impedimétrico eletroquímico para diagnóstico da tuberculose

RIBEIRO, Luisa Vogado¹

luisavogado@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de um dispositivo impedimétrico eletroquímico para detecção de *Mycobacterium tuberculosis*, agente causador da maioria dos casos de tuberculose (TB). (1) Relatada há mais de um século, a tuberculose foi a principal causa de morte por um único agente infeccioso até a pandemia de coronavírus (COVID-19), superando HIV/AIDS. (1) Os métodos tradicionais para o diagnóstico de TB são a baciloscopia de escarro, cultura líquida e, recentemente, testes moleculares. (2) Esses testes apresentam muitas limitações, como a baixa sensibilidade e a não diferenciação entre bacilos vivos e mortos, não sendo úteis para indicar a gravidade da doença. (2) Neste contexto, os sensores eletroquímicos têm atraído atenção devido à sua simplicidade, instrumentação de baixo custo, limites de detecção muito baixos e resposta rápida. (3) Neste estudo é apresentado um imunossensor impedimétrico eletroquímico para a detecção da proteína recombinante CFP10:ESAT6 via bioreconhecimento de anticorpos Anti-ESAT-6 e anti-CFP10 para diagnóstico de *Mycobacterium tuberculosis*. O imunossensor é desenvolvido utilizando eletrodos de óxido de índio estanho (ITO), cuja superfície foi modificada com (3-aminopropil) trietoxissilano (APTES) para imobilizar covalentemente os anticorpos. Estes são então imobilizados na superfície do eletrodo via linker EDC/NHS (1-Etil-3-(3-dimetilaminopropil) carbodiimida/N-Hidroxissuccinimida). Em seguida, ocorre a etapa de bioreconhecimento da proteína recombinante pCFP10:ESAT6, com concentração inicial de 200 ng/mL. A interação da proteína com a plataforma de reconhecimento de anticorpos foi diretamente monitorada e medida por voltametria cíclica (CV) e espectroscopia de impedância eletroquímica (EIS). Os imunossensores foram caracterizados com microscopia de força atômica (AFM) e espectroscopia Raman. Após a otimização dos parâmetros analíticos, alcançou-se uma resposta linear nas concentrações entre 0,5 ng mL⁻¹ a 50 ng mL⁻¹ de pCFP10:ESAT6, um limite de detecção de 4,80 ng mL⁻¹ e um limite de quantificação de 15,97 ng mL⁻¹, em um tempo de ensaio de 4 horas no total. Os resultados indicam que o imunossensor desenvolvido é adequado, preciso e seletivo para a detecção da proteína CFP10:ESAT6, apresentando recursos excelentes para futuras aplicações de diagnóstico *point-of-care* da tuberculose.

Palavras-chave: 1. Imunossensores 2. *Mycobacterium tuberculosis* 3. Sensor eletroquímico

Agência de fomento: CNPq (382371/2021-6)

Referências:

- 1 ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DA SAÚDE (OMS). **Global tuberculosis report 2021**. Geneva, 2021.
- 2 ACHARYA, B. *et al.* Advances in diagnosis of Tuberculosis: an update into molecular diagnosis of

Mycobacterium tuberculosis. **Molecular Biology Reports**, v. 47, n. 5, p. 4065–4075, 2020.

3 CANCINO-BERNARDI, J. *et al.* Detection of Leukemic Cells by using Jacalin as the Biorecognition Layer: a new strategy for the detection of circulating tumor cells. **ChemElectroChem**, v. 2, n. 7, p. 963–969, 15 July 2015.

PG52

Signatures of ultra-high energy cosmic ray sources in large-scale anisotropy measurements

LANG, Rodrigo Guedes¹; DOURADO, Luciana Andrade²; SOUZA, Vitor de²

lucianadourado@usp.br

¹Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

The most energetic particles that have ever been detected in the present Universe are the ultra-high energy cosmic rays. These fascinating particles originating from outer space are composed of protons and heavier nuclei with energies exceeding 1EeV (10^{18}eV). The identification of astrophysical sources that accelerate these nuclei up to the highest energies is hindered by cosmic magnetic fields responsible for the deflection of charged particles. Although the trajectories of ultra-high energy cosmic rays do not point straight towards the acceleration sites, their distribution of arrival directions can provide essential information to understand their origin. In particular, the Pierre Auger Observatory has recently measured a dipolar modulation in the large-scale anisotropies pointing almost to the opposite direction of the Galactic Center, which is an important piece of evidence of an extragalactic origin. (1) In this work, we further develop the understanding about the impact of astrophysical hypotheses in modeling the amplitude of the dipole measured by the Pierre Auger Observatory. We simulated the propagation of five representative stable primaries from nearby galaxies (three active galactic nuclei and 19 starburst galaxies) and from an uniform distribution of background sources taking into account extragalactic magnetic fields and relevant energy loss processes. The simulations were performed using the state-of-the-art propagation code CRPropa 3. (2) We obtained how the amplitude of the dipole behaves as a function of the energy for three sets of nearby galaxies and three luminosities of the sources so that we could encompass reasonable hypotheses of ultra-high energy cosmic ray sources. We also changed the density of the uniform distribution of background sources. For each density, a chi-squared statistical test was used to compare the amplitude of the dipole obtained from the simulations with the measurements of the Pierre Auger Observatory. (3) The density of background sources was considerably constrained regardless of the source model used.

Palavras-chave: Ultra-high energy cosmic rays. Astrophysical sources. Pierre Auger Observatory.

Agência de fomento: FAPESP (2021/10383-0)

Referências:

- 1 AAB, A. *et al.* Observation of a large-scale anisotropy in the arrival directions of cosmic rays above 8×10^{18} eV. **Science**, v. 357, n. 6537, p. 1266-1270, 2017. DOI: 10.1126/science.aan4338.
- 2 BATISTA, R. A. *et al.* CRPropa 3-a public astrophysical simulation framework for propagating extraterrestrial ultra-high energy particles. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2016, p. 038-1-038-22, May 2016. DOI: 10.1088/1475-7516/2016/05/038.
- 3 AAB, A. *et al.* Cosmic-ray anisotropies in right ascension measured by the Pierre Auger Observatory.

Astrophysical Journal, v. 891, n. 2, p. 142-1-142-10, 2020. DOI: 10.3847/1538-4357/ab7236.

PG53

CoupledDipoles.jl: A Julia package for Cold Atoms

MOREIRA, Noel Araujo¹; BACHELARD, Romain¹

noel.araujo.moreira@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In recent years, there has been a growing interest in studying collective effects, such as sub- and superradiance, especially with cold atom experiments. These experiments typically involve a large number of atoms, and their theoretical description has often focused on capturing the effective dynamics rather than the full quantum description of the system. The Linear Optics regime, which also corresponds to the Single-Excitation regime, has been extensively used through the so-called Coupled Dipole Equations, provided reasonably accurate results for several weak-drive experiments. However, as experiments explore increasingly complex regimes (strong drive, with many excitations), the demand for more sophisticated theoretical models has increased. (1) Our objective is to establish systematic comparisons between the already-established and newly-derived models, with an emphasis on their efficient implementation through numerical codes. To this end, we developed a library that serves as a foundation for present and future simulations, called CoupledDipoles.jl, written in the language Julia. This library was designed to deliver an efficient implementation of the basic routines for our cold atom system at different levels of modeling. It relies, for example, on the multi-threading paradigm of the parts of the code that benefit most from parallel programming, based on a study of the most common scenarios of simulations. Moreover, its code structure is also designed to be easily adaptable to explore other regimes and levels of modeling. We apply our tools to the study of Anderson Localization, exploring how the statistics of the scattered light may reveal experimental signatures of the localization transition. (2) While the previous results were based on the single-excitation approach, we investigated these statistics using our numerical tools, using the non-linear set of equations (Mean Field Equations) which takes into account the excited population of the atoms and thus describes the moderate-drive regime. This has allowed us to demonstrate that the presence of multiple excitations in the system will not prevent the localization phenomenon, provided that one monitors the elastically scattered light. Currently, various numerical results are scattered across different research groups, with the technical implementation often not provided, which can be considered a weakness from a scientific point of view. The ultimate goal of this package is to stimulate more unified behavior in the community, providing the first step of an adaptable package. By providing a centralized resource, we aim to facilitate collaboration across groups, and stimulate new work and the exploration of new regimes in the field.

Palavras-chave: Coupled dipoles. Computer package. Anderson localization.

Agência de fomento: CNPq (142430/2019-6)

Referências:

1 CIPRIS, A. *et al.* Subradiance with saturated atoms: population enhancement of the long-lived states.

Physical Review Letters, American Physical Society (APS), v. 126, n. 10, p.103604, Mar. 2021.

2 COTTIER, F. *et al.* Microscopic and macroscopic signatures of 3d anderson localization of light.
Physical Review Letters, American Physical Society (APS), v. 123, n. 8, p. 083401, Aug. 2019.

PG54

Avaliação da resistência à inativação fotodinâmica com curcumina em larvas de *Aedes aegypti*

GARBUIO, Matheus¹; INADA, Natalia Mayumi²; SOUZA, Mariana Santos de²; BAGNATO, Vanderlei Salvador²; LIMA, Alessandra Ramos²; SAMMARRO, Kamila Jessie²

matthew.gohan@gmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

Doenças tropicais negligenciadas, a exemplo da dengue, Zika vírus, Chikungunya e febre amarela, são transmitidas pelo vetor *Aedes aegypti*. Este mosquito tem uma capacidade bem estabelecida de desenvolver resistência a diferentes tipos de inseticidas convencionais (piretróides, organoclorados, organofosforados), utilizando múltiplos mecanismos de resistência. A inativação fotodinâmica (IFD) é uma técnica que vem se mostrando eficiente e atendendo às expectativas no controle do vetor, em especial utilizando a curcumina como fotolarvicida. (1) A IFD se baseia no uso de uma substância fotossensível (FS), que, quando excitada por uma fonte de luz em comprimento de onda adequado, libera espécies reativas de oxigênio, capazes de causar danos oxidativos às larvas, levando a efeitos letais. Neste aspecto, é importante monitorar a eficácia da IFD ao longo de gerações, para poder direcionar melhores estratégias de controle. O presente estudo, realizado em laboratório, teve como objetivo analisar, ao longo de 3 gerações (F1, F2 e F3), os efeitos de exposição de larvas de *Ae. aegypti* à IFD realizada com curcumina enquanto FS, considerando como respostas os aspectos do desenvolvimento do ciclo de vida do vetor. O trabalho foi conduzido desde a etapa de eclosão dos ovos, até o desenvolvimento do estágio larval 3. A IFD foi realizada tomando como base dois grupos: controle e tratado. A atividade fotolarvicida foi avaliada de acordo com bioensaios descritos em protocolo adaptado. (2) Para tal, considerou-se a concentração CL25 (0,001 mg/L), definida em estudos anteriores. (1) Foram avaliadas as possíveis mudanças na mortalidade ao longo das gerações. Os parâmetros analisados foram o número de ovos, taxa de eclosão e razão sexual entre os organismos sobreviventes. Não houve diferença significativa entre a mortalidade verificada nas gerações F1, F2 e F3 ($p > 0,05$). Com relação ao número de ovos, foi possível observar que a geração F2 apresentou diferença significativa entre os grupos sujeitos à IFD e o controle, o que, porém, não foi observado nas demais gerações. A razão sexual entre os mosquitos adultos apresentou uma média de 53:47% da população de fêmeas em relação a machos. Contudo, a taxa de oviposição das fêmeas apresentou uma diminuição, sugerindo uma redução na fecundidade ao longo das gerações. Este resultado preliminar poderá, mediante demais investigações, evidenciar possíveis efeitos do fotolarvicida sobre aspectos reprodutivos, os quais são relacionados a capacidade vetorial do mosquito. Sendo assim, investigações considerando mais gerações, tal como experimentos adicionais do fitness do mosquito estão em andamento para avaliar outros parâmetros sugestivos de resistência à IFD.

Palavras-chave: Fototoxicidade. Controle de vetores. Biofotônica ambiental.

Agência de fomento: CAPES (88887.662159/2022-00)

Referências:

1 GARBUIO, M. *et al.* Formulations of curcumin and d-mannitol as a photolarvicide against *Aedes aegypti* larvae: sublethal photolarvicidal action, toxicity, residual evaluation, and small-scale field trial. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 38, p. 102740, 2022. DOI: 10.1016/j.pdpdt.2022.102740.

2 World Health Organization. **Guidelines for laboratory and field testing of mosquito larvicides.** 2005. Disponível em: <https://www.who.int/publications/i/item/WHO-CDS-WHOPES-GCDPP-2005.13>. Acesso em: 06 jul. 2023.

PG55

Nanossistemas biomiméticos contendo Paclitaxel para tratamento do neuroblastoma

ZUCOLOTTO, Valtencir¹; BOTASSIO, Yara Gabriele¹; CARDOSO, Valéria Maria de Oliveira¹

yara.botassio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O neuroblastoma (NB) é um tipo de tumor maligno extracraniano, originado a partir da medula adrenal ou dos gânglios paravertebrais, que acomete principalmente recém-nascidos, lactentes e crianças, com idade inferior a 10 anos. Segundo a American Cancer Society, o NB é responsável por mais de 15% da mortalidade, relacionada ao câncer, na população infanto-juvenil. Apesar dos avanços com os tratamentos convencionais, poucos êxitos foram obtidos em relação às taxas de sobrevida dos pacientes, consideradas, ainda, muito baixas. Esse cenário mostra a gravidade da situação e a urgente necessidade de busca por alternativas terapêuticas mais eficazes. A nanotecnologia é uma abordagem promissora, oferecendo possibilidades direcionadas à alvos tumorais específicos, melhorando propriedades farmacocinéticas e farmacodinâmicas dos fármacos nanoencapsulados e a reduzindo a toxicidade. (1) Neste estudo, nanopartículas (NPs) de poli(ácido lático-co-ácido glicólico) (PLGA) carregadas com paclitaxel (PTX) foram desenvolvidas como alternativa para entrega específica do PTX no tecido tumoral. As NPs foram preparadas pelo método de nanoprecipitação anti-solvente e emulsão simples (utilizando sonificador). A caracterização físico-química foi realizada através da análise de tamanho e potencial zeta (ZP), utilizando Dynamic Light Scattering (DLS) e Nanoparticle Tracking Analysis (NTA). Após otimização da síntese, a melhor nanoformulação foi selecionada. O diâmetro das NPs foi da ordem de $166,2 \text{ nm} \pm 0,3 \text{ nm}$; PDI foi de $0,18 \pm 0,02$, indicando que as amostras apresentaram homogeneidade de distribuição de tamanho, e ZP = $-26,8 \text{ mV} \pm 0,4 \text{ mV}$, apontando estabilidade elétrica das NPs. O NTA revelou um tamanho de $148,4 \text{ nm} \pm 4,3 \text{ nm}$, corroborando os dados de tamanho do DLS. A concentração das NPs foi de $1,22 \times 10^{12}$ partículas/mL. A nanoencapsulação do PTX oferece uma oportunidade para melhorar suas propriedades físico-químicas e aumentar sua eficácia antitumoral. A próxima etapa deste estudo será o revestimento das NPs com membranas de células tumorais extraídas de NB (SH-SY5Y). A utilização da nanotecnologia para carregamento do PTX mostra um potencial significativo para aprimorar os resultados terapêuticos, superar as limitações dos tratamentos convencionais e abrir caminho para uma abordagem mais direcionada e eficiente no tratamento do neuroblastoma. (2)

Palavras-chave: Nanopartículas biomiméticas. Paclitaxel. Neuroblastoma

Agência de fomento: CAPES (8887.821559/2023-00)

Referências:

1 MORENO, D. *et al.* Pharmacodynamics of cisplatin-loaded PLGA nanoparticles administered to tumor-bearing mice. **European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics**, v. 74, n. 2, p. 265-274, Feb. 2010.

2 BACANLI, M. *et al.* Evaluation of cytotoxic and genotoxic effects of paclitaxel-loaded PLGA nanoparticles in neuroblastoma cells. **Food and Chemical Toxicology**, v. 154, p. 112323-1-112323-7, Aug. 2021. DOI: 10.1016/j.fct.2021.112323

PG56

Tomografia de Coerência Ótica (OCT): scanner portátil de alta sensibilidade para imageamento da impressão digital de adultos e bebês

YASUOKA, Fatima Maria Mitsue¹; BUOZZI, Mario Trama¹; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹

mariobuozzi2332@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A identificação de seres humanos é fundamental para interesses legais e governamentais. Uma das formas mais comuns é a comparação da impressão digital com uma base de dados obtida previamente. As tecnologias para imageamento 2D de impressões digitais, no entanto, podem não ser eficientes nos casos em que a pele tenha sofrido alterações, propositas ou não, e em bebês, que têm as estruturas da digital muito pequenas. Um *scanner* utilizando a técnica de Tomografia de Coerência Ótica (OCT) está sendo desenvolvido no Instituto de Física de São Carlos em parceria com a empresa HA TECNO e será utilizado com o objetivo de tornar o processo de identificação mais seguro e confiável. A Tomografia de Coerência Ótica (OCT), utiliza interferometria de luz baixa coerência (Diodo Super Luminescente – SLD) no infravermelho próximo (836 nm) para gerar um perfil de refletividade em função da profundidade da amostra. (1) O interferômetro em desenvolvimento opera no domínio da frequência, utilizando um espectrômetro customizado, onde são capturadas as franjas de interferência, sobre as quais a transformada de Fourier é aplicada gerando um perfil de refletividade em função da profundidade em um ponto da amostra chamado de A-Scan. Utilizando um microespelho giratório é possível varrer uma linha da amostra e, ao concatenar os A-scans dos pontos, é formada uma imagem de seção transversal denominada B-scan. Acionando o eixo perpendicular do espelho, são gerados vários B-scans e, agrupando-os pode ser obtido um volume tomográfico, a partir do qual se faz a leitura da digital interna (derme) que é idêntica à externa (epiderme), sendo possível, desta forma, identificar fraudes. O objetivo desta pesquisa é obter um sistema portátil e rápido, com leituras de até 5 s. Contudo, para o reconhecimento da digital, é necessário escanear uma área de 15 x 15 mm com resolução de 20 μm em adultos ou 5 x 5 mm com resolução de 10 μm em bebês, um total de 560 e 250 mil pontos, o que torna a velocidade de aquisição um desafio. O equipamento será utilizado em hospitais, nos bebês e nas mães para evitar trocas e tráfico de bebês, e em locais de alta segurança. No sistema atual, foram gerados A-scans de um espelho totalmente refletor, de uma lamínula de vidro de 150 μm de espessura e de um dedo. Os valores dos parâmetros de sensibilidade e *fall off*, que são a menor refletividade detectável e a profundidade em que a intensidade do sinal cai pela metade, são da ordem de 80 dB e 350 μm , respectivamente, que ainda não são ideais para a aplicação. Os próximos passos serão trocar a câmera e o espelho giratório para melhorar a sensibilidade, o *fall off* e gerar B-scan e volumes tomográficos.

Palavras-chave: Optical-coherence-tomography. Impressão-digital. Fall-off.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 DREXLER, W.; FUJIMOTO, J. G. **Optical coherence tomography**: technology and applications. Berlin: Springer, 2015. v. 2.

PG57

Análise das propriedades fotoquímicas e de ação antimicrobiana do azul de metileno em solventes utilizados para a preservação de órgãosVOLLET FILHO, Jose Dirceu¹; CROCE, Julia Nonato¹; KURACHI, Cristina¹

juliacroce@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O transplante de órgãos é um procedimento médico que vem sendo cada vez mais realizado e em várias situações é a única maneira de preservar a vida de um paciente. Porém, a espera para o procedimento é um processo frequentemente demorado devido a diversos empecilhos que tornam os órgãos inviáveis para o transplante, sendo um dos principais fatores a contaminação por microrganismos, o que resulta na morte de milhares de pessoas anualmente enquanto aguardam na fila pela cirurgia. (1) É então necessária a busca por métodos capazes de realizar a descontaminação de órgãos sem prejudicar seu funcionamento, assim aumentando a quantidade de órgãos saudáveis disponíveis para transplantação e então suprimindo a demanda de pacientes. A terapia fotodinâmica antimicrobiana é um método de combate a agentes infecciosos, conhecida por não causar danos a tecidos saudáveis e evitar quadros de resistência antimicrobiana. A técnica tem grande eficácia em estudos *in vitro* e *in vivo* e é uma grande candidata para solucionar o problema da contaminação de órgãos, podendo agir durante processo de captação e preparo do órgão com líquidos de preservação. Estudos *ex vivo* desta abordagem apresentaram uma diferença no comportamento esperado dos agentes fotossensibilizadores, que tiveram sua eficácia fotodinâmica antimicrobiana consideravelmente reduzida no caso do azul de metileno, molécula com potencial fotodinâmico bem conhecido. (2-3) Por isso, são necessários estudos detalhados para compreender melhor os mecanismos envolvidos na ação fotodinâmica do azul de metileno e de outros fotossensibilizadores em soluções de preservação e compreender os fatores que levam a técnica a se tornar ineficiente. Tal investigação permitirá que novas estratégias sejam propostas para solucionar o problema. Portanto, durante esta investigação, serão realizados estudos espectroscópicos do azul de metileno nas soluções de preservação Steen, Perfadex e Custodiol, com aumento gradual da complexidade do meio até que esse se aproxime das características do ambiente *ex vivo* de aplicação da terapia fotodinâmica antimicrobiana. Serão feitas análises dos espectros de absorção, ensaios de fotodegradação e estudos sobre a ação antimicrobiana, com excitação no comprimento de onda de 660 nm. Com esses dados, será realizada a modelagem do sistema para analisar precisamente as interações entre as moléculas do meio e quantificar as transições entre os estados eletrônicos da molécula, estudando também por qual tipo de interação o fotossensibilizador realiza a ação antimicrobiana e comparando os dados obtidos para cada meio. É esperado que, com essas informações, seja possível compreender as interações do fotossensibilizador com o meio e os efeitos que prejudicam a ação fotodinâmica, auxiliando na busca por soluções viáveis que tornem a técnica eficiente e aplicável na descontaminação de órgãos para transplante.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Descontaminação de órgãos. Transplante de órgãos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE TRANSPLANTE DE ÓRGÃOS. Dados numéricos da doação de órgãos e transplantes realizados por estado e instituição no período: janeiro / junho – 2022. **Registro brasileiro de transplantes**, v. 28, n. 2, p. 16, 2022.
- 2 KASSAB, G. *et al.* Lung surfactant negatively affects the photodynamic inactivation of bacteria: in vitro and molecular dynamic simulation analyses. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 119, n. 25, p. e2123564119-1-e2123564119-9, 2022.
- 3 GÁMEZ, Y. M. **Avaliação de técnicas ópticas para descontaminação de órgãos sólidos para transplante em modelos in vitro e ex vivo.** 2023. Tese (Doutorado em Física Biomolecular) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023. DOI:10.11606/T.76.2023.tde-31032023-113033.

PG58

Saturation-induced bistability in strontium atoms interacting with an optical cavity

RIVERO JEREZ, Yajaira Dalila¹; FRANÇA, Gustavo Henrique de¹; PESSOA JUNIOR, Claudio¹; COURTEILLE, Philippe Wilhelm¹

gustavo.franca@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

We study the interaction between a cloud of ultracold strontium atoms and the light modes of an optical ring cavity laser-pumped near a forbidden atomic transition. In our cavity 0.1 photons are enough to saturate the narrow transition, which enables us to study saturation-induced effects even on resonance without being hampered by spontaneous emission. Furthermore, with the cavity decay rate exceeding by far the rate of spontaneous emission, we are in the so-called 'bad cavity' limit. The number of interacting atoms is sufficiently high to reach the strong collective coupling regime, where the energy exchange exceeds the energy loss rate, resulting in a characteristic normal-mode splitting of the cavity transmission spectrum. When the cavity was pumped sufficiently strong, however, our measured transmission spectra revealed the presence of a third peak near the atomic resonance, which has not been observed before. We were able to explain this peak as being due to saturation induced bistability caused by a nonlinear interaction between the Autler-Townes effect and normal-mode splitting. (1-3)

Palavras-chave: Quantum optics. Bistability. Nonlinear effects.

Agência de fomento: CAPES (88887.703592/2022-00)

Referências:

- 1 GRIPP, J.; MIELKE, S. L.; OROZCO. Evolution of the vacuum Rabi peaks in a detuned atom cavity system. **Physical Review A**, v. 56, n. 4, p. 3262-3272, 1997.
- 2 GOTHE, H.; VALENZUELA, T.; CRISTIANI, M.; ESCHNER, J. Optical bistability and nonlinear dynamics by saturation of cold Yb atoms in a cavity. **Physical Review A**, v. 99, n. 1, p. 013849-1-013849-5, Jan. 2019.
- 3 KARMSTRAND, T. *et al.* **Unconventional saturation effects at intermediate drive in a lossy cavity coupled to few emitters**. 2021. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2110.00595.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2023.

PG59

Planejamento de novos agentes quimioterápicos para o tratamento da doença de Chagas

ANDRICOPULO, Adriano Defini¹; OLIVEIRA, Aldo Sena de²; DÖRING, Thiago Henrique¹; FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes¹

thiago.doring@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

A doença de Chagas (CD), causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, foi descoberta em 1909 pelo médico brasileiro Carlos Chagas, que identificou não apenas o agente etiológico, como também o vetor da doença e o modo de transmissão. A CD afeta aproximadamente 8 milhões de pessoas em todo o mundo, e cerca de 25 milhões vivem em áreas de risco de infecção. Atualmente, é tratada com compostos nitroheterocíclicos, como os fármacos benzonidazol e nifurtimox, que apresentam resultados satisfatórios apenas na fase aguda e causam efeitos sérios adversos. (1) Entretanto, o nifurtimox teve sua comercialização interrompida no Brasil por apresentar elevada toxicidade, podendo causar alterações na estrutura do tecido cardíaco, sendo o benzonidazol a única alternativa atualmente disponível, mas com eficácia apenas na fase aguda. O principal alvo molecular validado para o planejamento de fármacos é a cisteína-protease cruzaina, presente em todo o ciclo de vida do parasita. A enzima é importante para o desenvolvimento, sobrevivência e diferenciação do protozoário, sendo responsável por sua nutrição, evasão do sistema imune e invasão de novos tecidos. (2) Para o desenvolvimento de novos inibidores, algumas características são desejáveis: carga neutra, baixa massa molecular e baixa toxicidade, estabilidade termodinâmica e hidrolítica. Estas características permitem que fármacos sejam capazes de atravessar membranas biológicas, tanto para absorção pelo organismo quanto para atingir o alvo biológico. Bons rendimentos sintéticos e baixo custo de produção também são características desejáveis. Para se atingir este objetivo no planejamento de fármacos, a pesquisa e desenvolvimento de medicamentos modernos combina habitualmente métodos de planejamento baseado na estrutura do receptor (SBDD – sigla em inglês para Structure-based drug design), como por exemplo técnicas de ancoragem molecular e de dinâmica molecular, e planejamento baseado na estrutura do ligante (LBDD – sigla em inglês para Ligand-based drug design), como por exemplo técnicas de QSAR 2D e 3D (3). Utilizando as técnicas combinadas de LBDD e SBDD, o presente trabalho busca desenvolver novos agentes quimioterápicos tripanocidas, através de coleções de compostos altamente qualificados obtidos por meio de colaborações. Após estudos computacionais, as estruturas mais promissoras serão sintetizadas pelo Instituto de Química da UNICAMP, para posterior ensaios in vitro contra a forma amastigota de *T. cruzi*, em conjunto com avaliação de citotoxicidade e seletividade.

Palavras-chave: Doença de Chagas. Cruzaina. Planejamento de Fármacos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 SALES JUNIOR., P. A. *et al.* Experimental and clinical treatment of Chagas disease: a review. **American Journal of Tropical Medicine and Hygiene**, v. 97, n. 5, p. 1289-1303, Oct. 2017.
- 2 FERREIRA, L. G.; ANDRICOPULO, A. D. Targeting cysteine proteases in trypanosomatid disease drug discovery. **Pharmacology and Therapeutics**, v. 180, p. 49-61, 2017. DOI: 10.1016/j.pharmthera.2017.06.004.
- 3 ALMEIDA, T. C. *et al.* Synthesis, in vitro and in vivo anti-Trypanosoma cruzi and toxicological activities of nitroaromatic Schiff bases. **Biomedicine and Pharmacotherapy**, v. 108, p. 1703-1711, 2018. DOI: 10.1016/j.biopha.2018.09.176.

PG60

Propagadores de quark no calibre de Landau

MENDES, Tereza Cristina da Rocha¹; LEAL JUNIOR, Jesuel Marques¹

jesuel.leal@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os propagadores de quark, funções de correlação entre os graus de liberdade fermiônicos da cromodinâmica quântica (QCD), devem conter informações relevantes para o estudo de fenômenos não-perturbativos da teoria. (1) Apresentamos resultados preliminares para o propagador de quark no calibre de Landau calculados em uma simulação de QCD na rede, um dos métodos mais robustos para estudo do regime não-perturbativo. (2) O calibre de Landau é o mais utilizado para estudos de propagadores na rede e no contínuo. (3) Os resultados apresentados foram obtidos no âmbito de um projeto para o cálculo do vértice quark-glúon à temperatura finita.

Palavras-chave: QCD na rede. Propagadores.

Agência de fomento: FAPESP (2019/10913-0)

Referências:

- 1 VANDERSICKEL, N.; ZWANZIGER, D. The Gribov problem and QCD dynamics. **Physics Reports**, v. 520, n. 4, p. 175-251, 2012.
- 2 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice**. New York: Springer, 2010.
- 3 OLIVEIRA, O; SILVA, P. J.; Finite temperature Landau gauge lattice quark propagator. **European Physical Journal C**, v. 79, n. 9, p. 7931-793-12, 2019.

PG61

Produção de um feixe supersônico de Rb_2 no estado $X^1\Sigma_g^+(v_X = 0)$ por meio de bombeamento óptico

FERNÁNDEZ, David Rodríguez¹; TORRES, Manuel Lefran¹; CARDOSO, Marcos Roberto¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹

lefran@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho, relatamos a produção de um feixe supersônico de Rb_2 no vibracional $v_X = 0$ do estado fundamental a partir de um feixe molecular inicialmente distribuído em diferentes estados vibracionais, por meio da técnica de bombeamento óptico utilizando uma fonte de luz de banda larga espectralmente moldada. Transições ópticas do estado fundamental $X^1\Sigma_g^+$ para o potencial excitado $B^1\Pi_u$ podem ser induzidas por essa fonte, composta por diversos lasers de diodo multimodo, na faixa de $14350 - 14730\text{ cm}^{-1}$, permitindo o bombeamento da população para o estado $X^1\Sigma_g^+(v_X = 0)$. A moldagem espectral é realizada usando uma configuração de grade de difração $4F$ e um dispositivo de micro-espelhos digital (DMD). As moléculas foram detectadas por a técnica de fotoionização, através de transições entre os estados $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Pi_u$ usando um laser de corante pulsado, na faixa de $680 - 685\text{ nm}$, e em seguida, fotoionizadas por um laser pulsado de 532 nm . Os espectros de Rb_2^+ mostram que a maioria das moléculas são bombeadas para $v_X = 0$. Utilizamos esse feixe molecular vibracionalmente frio para realizar espectroscopia do potencial $C^1\Pi_u$. Simulações indicam que um resfriamento rotacional pode ser alcançado melhorando o esquema de moldagem espectral usando uma grade de difração e uma matriz de fase de imagem virtual(VIPA) no sistema $4F$. (1)

Palavras-chave: Bombeamento óptico. Espectroscopia molecular. Fotoionização.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 TORRES, M. A. L. *et al.* Proposal for Zeeman slowing of Rb_2 molecules in a supersonic beam, inducing internal cooling. **Journal of Physics B**, v. 56, n. 6, p. 065301-1-065301-10, Mar. 2023.

PG62

Quantum complexity in the presence of quantum error correction and prevention

SILVA, Adonai Hilario da¹; MORAZOTTI, Nicolás André da Costa¹; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹
adonai.silva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Complexity theory is the study of temporal and spatial resources required for solving computational tasks. With the advent of quantum computation, the complexity of quantum algorithms was usually treated as how the number of necessary quantum gates increased as the size of the input grew. An alternative approach, presented by M. A. Nielsen, is based on the idea that geodesics on the manifold of the symmetry group of transformations on n qubits, the $SU(2^n)$ group, are curves whose length is a lower bound of the usual definition of complexity, that is, the number of required quantum logic gates. (1) The general proposal is to use some suitable Riemannian metric that penalizes directions that correspond to hard-to-make operations. More recently, an alternative method was proposed, in which a sub-Riemannian metric is used instead, meaning some dimensions of the manifold are completely forbidden and the geodesics live in a subgroup. (2-3) In the current developments of quantum computers, sometimes called the NISQ era, the main obstacle to reaching high-scale quantum computers is the presence of noise in such devices. With that in mind, the objective of this work is to utilize the sub-Riemannian geometry formalism to investigate the influence of noise and error correction on the complexity of a problem. Initially, we study the case of a single noisy qubit, which can be simulated using quantum purification with an ancillary qubit. We aim to identify geodesics that connect the identity to a unitary operation, sufficiently close to the ideal case, despite the presence of noise. The main challenge lies in determining the unknown initial conditions for the desired unitary operator. An approach that has shown promising results involves utilizing a neural network to correlate unitary operations with the initial conditions. Interestingly, the predicted initial conditions can lead to high-fidelity gates using control fields that do not require rapid oscillations or pulses, as seen in dynamic decoupling methods, for example. Future work includes extending this idea to a two-qubit case, as high-fidelity single-qubit gates combined with entanglement enable universal quantum computation. Furthermore, we might consider testing the calculated control fields on practical devices, such as those provided by IBM and other companies.

Palavras-chave: Geodesic. Unitary group. Complexity.

Agência de fomento: CNPq (160849/2021-7)

Referências:

1 NIELSEN, M. A. **A geometric approach to quantum circuit lower bounds**. 2005. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0502070.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2023.

2 SWADDLE, M. *et al.*. Generating three-qubit quantum circuits with neural networks. **Physics Letters**

A, v. 381, n. 39, p. 3391-3395, 2017.

3 PERRIER, E.; TAO, D.; FERRIE, C. Quantum geometric machine learning for quantum circuits and control. **New Journal of Physics**, v. 22, n. 10, p. 103056, 2020.

PG63

Integração do framework PyMR com o ambiente integrado de desenvolvimento Spyder e sua adaptação à projetos de Ressonância Magnética

CORREIA, Danilo Silva¹; TANNUS, Alberto¹

dacorriea@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Ressonância Magnética (RM) esteve sempre à frente das ferramentas de análise e diagnóstico por suas características não-invasiva e não-destrutiva do objeto em estudo. Recentes pesquisas em diversas áreas, como a de agronomia (1), estão trazendo tal tecnologia de forma mais acessível e portátil e que necessita de flexibilidade para que os pesquisadores possam adaptá-las às suas necessidades. O desenvolvimento de novos métodos de ressonância magnética, como o FREE (2), exige atualmente o avanço e a flexibilidade não encontrados em equipamentos comerciais, gerando demanda para o desenvolvimento realizado dentro deste escopo. A importância do estudo das restrições dos softwares comerciais para o uso na programação dos equipamentos de Ressonância Magnética se reflete na dificuldade de programação das ferramentas de auxílio para desenvolvimento, gerenciamento e manutenção dos itens de software. Além disso, os principais softwares existentes são de difícil acesso e não integram ferramentas de programação dos equipamentos de Ressonância Magnética com ferramentas de desenvolvimento de software de código livre. O objetivo deste projeto é integração do PyMR *framework*.(3) que auxilia a programação, gerenciamento de equipamentos e criação de interfaces com o ambiente de desenvolvimento Spyder onde deverão ser gerados os plug-ins, oferecendo maior suporte e agilidade ao pesquisador. Os plug-ins integrados ao Spyder têm a função de auxiliar o pesquisador com tarefas repetitivas ou que possam ser programadas, acelerando o processo de desenvolvimento. Todo o *framework*.PyMR, assim como os plug-ins, são suportados por técnicas atualizadas de programação que geram uma API capaz de ser integrada com outras ferramentas externas como simuladores e bibliotecas científicas. As versões preliminares dos plugins já estão em uso no sistema de RM local do CIERMag e com colaboradores internacionais, provendo um ambiente para práticas, testes e aperfeiçoamentos.

Palavras-chave: Python Magnetic Resonance Framework. Espectrômetro digital de RM. Spyder IDE.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 COLNALGO, L. A. *et al.* Why is inline NMR rarely used as industrial sensor? Challenges and opportunities. **Chemical Engineering Technology**, v. 37, n. 2, p. 191-203, Feb. 2014. DOI: 10.1002/ceat.201300380.
- 2 TORRES, E. *et al.* B1-gradient based MRI using frequency-modulated Rabi-encoded echoes. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 87, n. 2, p. 674-685, Feb. 2022.

3 PIZETTA, D.C. **PyMR**: um framework para programação de sistemas de ressonância magnética. 2018. 130 p. Tese (Doutorado em Ciências), Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

PG64

Magnetic Resonance Imaging for short relaxation times applied to seed evaluation

ALVES, Rafael¹; GOMES JUNIOR, Francisco Guilhien¹; TANNÚS, Alberto²; MARCOLAN, Julia²; MARASSI, Agide²

juliamarcolan@usp.br

¹Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” - USP; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

According to an analysis conducted by the Center for Advanced Studies in Applied Economics (Cepea) at ESALQ/USP, in partnership with the Confederation of Agriculture and Livestock of Brazil (CNA), the agricultural sector plays a crucial role in the Brazilian economy. In 2021, the Gross Domestic Product (GDP) of Brazilian agriculture experienced a growth of 8.36%. (1) This increase represents a significant share of 27.4% of the total Brazilian GDP. Furthermore, statistics collected by the Brazilian Association of Seeds and Seedlings (Abrasem) reveal that Brazil holds the top position in the global ranking of soybean seed production. The quality of seeds is a critical factor that significantly influences crop development and directly impacts productivity levels. Current seed evaluation methods, such as the tetrazolium test, the germination test and the utilization of X-ray images, still do not provide accurate and non-destructive identification of lesions in the early stages of the process. Therefore, Magnetic Resonance Imaging (MRI) has been proposed to evaluate seed injuries, allowing observing internal structures on a three-dimensional scale. While MRI is commonly used for imaging soft tissues, its application to hard tissues with low water content, such as bones, teeth, and seeds, remains challenging. In these cases, the water content is typically confined to a solid phase, i.e. water interacting with biological tissue or confined in a porous system, which reduces its mobility and results in a relaxation profile with short or ultra-short relaxation times (i.e., $T_2 \approx 0.1 - 10$ ms). Producing images of samples with very short transverse relaxation time depends on the acquisition and encoding of the signal done very quickly after excitation and before the signal decay in the transverse plane. The challenge in this implementation lies in the existence of an intrinsic hardware delay time, also known as dead time, required to switch between the two operating modes of a radio frequency transmit/receive. (2) Some techniques were developed in an attempt to overcome these limitations and produce high-resolution images for samples with short transverse relaxation time, among them: Fast Low Angle Shot (FLASH), Zero Echo Time (ZTE), Ultra-short Echo Time (UTE) and Sweep imaging with Fourier transformation (SWIFT). Results obtained previously in (3) demonstrated that the transverse relaxation time of a healthy soybean seed falls within the range of 0.1 - 10 ms. Moreover, images of various seed types were obtained using FLASH, ZTE, and a modified variation of ZTE with the addition of a magnetization transfer pulse. This research project aims to investigate the application of MRI and image segmentation techniques for evaluating mechanical injuries and damage inflicted on seeds by insects during field or storage conditions. The approach to achieve this objective will involve utilizing various NMR methods and imaging segmentation techniques. Additionally, the implementation of these NMR methods will be carried out using two spectrometers: Bruker and the Digital Magnetic Spectrometer (DMRS) developed by Centro de Imagens e Espectroscopia por Ressonância Magnética (CIERMag).

Palavras-chave: Magnetic resonance. Short relaxation times. Seeds.

Agência de fomento: CAPES (88887.803866/2023-00)

Referências:

1 CENTRO DE ESTUDOS AVANÇADOS EM ECONOMIA APLICADA. PIB-AGRO/CEPEA: PIB do AGRO cresce 8,36% em 2021; participação no PIB brasileiro chega a 27,4%. **PIB do Agronegócio**. 15 mar. 2022. Disponível em https://www.cepea.esalq.usp.br/upload/kceditor/files/Cepea_CNA_PIB_JAn_Dez_2021_Mar%C3%A7o2022.pdf. Acesso em: 4 de jul. 2023.

2 MASTROGIACOMO, S. *et al.* Magnetic resonance imaging of hard tissues and hard tissue engineered bio-substitutes. **Molecular Imaging and Biology**, v. 21, p. 1003-1019, 2019.

3 MARASSI, A. G. **Nuclear magnetic resonance methodologies applied for seed evaluation**. 2021. 97 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

PG65

Descoberta de candidatos antivirais contra a protease nsP2pro de Chikungunya

FERNANDES, Rafaela Sachetto¹; OLIVA, Glaucius¹; CIPRIANO, Lavinia¹; DOLCI, Isabela¹; GODOY, Andre Schutzer de¹

lavinia@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O vírus Chikungunya (CHIKV) é um arbovírus da família *Togaviridae*, transmitido pela picada de mosquitos das espécies *Aedes albopictus* e *A. aegypti*. (1) Infecções causadas pelo CHIKV foram registradas pela primeira vez na Tanzânia, em 1952, durante um surto de febre chikungunya ocorrido na região. (2) Após este primeiro relato, inúmeras infecções por CHIKV foram identificadas em países da Ásia e África subsaariana, e na última década, o vírus se espalhou por mais de 100 países nas Américas, África, Europa e Ásia, afetando inclusive o Brasil, onde o número de casos vem aumentando desde o primeiro surto de febre chikungunya em 2014. Até o presente momento, não foi estabelecido um protocolo de tratamento para a febre chikungunya, e não há uma vacina disponível, sendo tomadas apenas medidas para alívio dos sintomas. A demanda por um tratamento e um vacina contra CHIKV é cada vez mais urgente, já que é considerada uma doença tropical negligenciada, afetando principalmente pessoas de classe socioeconômica mais baixa e países subdesenvolvidos, onde o controle de vetores é a única medida profilática apresentada, limitando a contenção do vírus. (3) A protease nsP2pro do CHIKV, uma cisteína viral protease, é responsável por processar quatro poliproteínas não estruturais (nsPs), que formam o complexo de replicação, sendo assim outro alvo promissor para drogas. Os objetivos deste trabalho incluem a clonagem, expressão e purificação da nsP2pro, para sua posterior caracterização e busca de potenciais compostos antivirais. Os genes sintéticos codificadores das proteínas de CHIKV foram sintetizados pela empresa GenScript, com base na sequência GenBank KY703894.1. A clonagem do fragmento codificante da nsP2 domínio protease foi realizada utilizando o método Gibson Assembly e o vetor pET-M11. Os plasmídeos contendo os fragmentos de interesse são utilizados para transformar células de *Escherichia coli* pelo método de choque-térmico em diferentes linhagens de expressão. Os plasmídeos de interesse são purificados utilizando um kit comercial, o PureYield™ Plasmid Miniprep System (PROMEGA®), segundo as especificações do fabricante. Em seguida, os plasmídeos extraídos e purificados são transferidos para as linhagens de expressão no qual foi utilizada Rosetta2 (DE3). As linhagens bacterianas, já contendo os vetores de interesse, foram utilizadas para testes de expressão em meio TB contendo antibióticos apropriados, crescidos à 37 °C durante 12 h, sob a agitação de 200 rpm, até a D.O. atingir o valor de 600 nm para então, logo depois adicionar 0,5 mM de isopropil β -D-1-thiogalactopiranosídeo (IPTG) ao meio, e continuar a agitação à 18 °C por cerca de 12 h. Após a expressão, as bactérias foram submetidas à centrifugação e lise celular para purificação. A purificação foi feita por cromatografia de afinidade por níquel em uma coluna HisTrap e uma segunda etapa utilizando a coluna HiLoad Superdex 75 16/60 (GE Healthcare®). A pureza das amostras é checada em cada passo através do gel de eletroforese 15% (SDS-Page).

Palavras-chave: Chikungunya. Protease. Antivirais.

Agência de fomento: FAPESP (2022/01266-3)

Referências:

- 1 VAN AALAST, M. *et al.* Long-term sequelae of chikungunya virus disease: a systematic review. **Travel Medicine and Infectious Diseases**, v.15, p.8-22, 2017.
- 2 GELFAND, M. The Sick African. Cape Town: Stewart Printing Co. 1948
- 3 MILLSAPPS, E. M.; UNDERWOOD, E. C.; BARR, K. L. Development and application of treatment for Chikungunya fever. **Research and Reports in Tropical Medicine**, v.13, p.55-66, 2022.

PG66

Desenvolvimento de sistema led de iluminação para terapia fotodinâmica mediada por rosa bengala para inibição de infecção bacteriana na córnea do olho humano.

OLIVEIRA, André Orlandi de¹; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹; LAISSENER, Bruno Sartorelli¹

brunosl@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Esse projeto se faz presente no âmbito de instrumentação óptica voltada para oftalmologia, mais especificamente na elaboração de um sistema óptico de iluminação por LED com função de mediar o processo de terapia fotodinâmica no combate de ceratites infecciosas em olhos humanos como cromóforo Rosa Bengala. Os desafios de tal projeto estão ligados à obtenção de um sistema óptico que seja capaz de gerar uma região de iluminação com características físicas ideais para que o tratamento obtenha melhor performance. Entre tais atributos, podemos citar a potência óptica, perfil de intensidade, formato e diâmetro da região iluminada e distância de operação do equipamento. Aliadas a tais fatores, levamos em conta ainda medidas de proteção necessárias para a preservação das demais estruturas do sistema ocular uma vez que tratamos de relativa alta potência. Complexidades inerentes ao sistema fazem-se presentes pela adoção de tais medidas pois, após repetidas iterações, definimos uma configuração de iluminação não axial (considerando o eixo óptico ocular) que por sua natureza angulada, incita a aplicação do princípio de Scheimpflug para adequação da orientação de elementos ópticos para definição de uma região de iluminação focada.(1)

Palavras-chave: Óptica. Oftalmologia. Rosa Bengala.

Agência de fomento: CNPq (160863/2021-0)

Referências:

1 SINHAROY, I.; RANGARAJAN, R.; CHRISTENSEN, M. P. Geometric model for an independently tilted lens and sensor with application for omnifocus imaging. **Applied Optics**, v. 56, n.9, p.D37-D46, 2017.

PG67

Estudo do sinergismo de arabinofuranosidase de *Bifidobacterium longum* com xilanases para produção de pré-bióticos a partir de bagaço de cana-de-açúcar

CAPETTI, Caio Cesar de Mello¹; POLIKARPOV, Igor¹; PELLEGRINI, Vanessa de Oliveira Arnoldi¹

caiocapetti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Rejeitos agroindustriais frequentemente são materiais ricos em celulose, hemicelulose e lignina (materiais lignocelulósicos). O reaproveitamento desses materiais com objetivo de obter produtos de valor agregado tem sido uma tendência da indústria agrícola por mitigar problemas de descarte e aumentar lucros. Tal reaproveitamento, passa, necessariamente, pela desconstrução e fracionamento do material lignocelulósico, cuja fração hemicelulósica é amplamente explorada nesse contexto. Particularmente, são de interesse biotecnológico mecanismos de degradação do xilano, que é o principal constituinte da hemicelulose da cana-de-açúcar, cuja cultura é um dos principais motores da agroindústria brasileira. (1) O xilano de bagaço de cana-de-açúcar apresenta um esqueleto principal constituído de unidades de xilopiranosídeo, ao qual estão ancorados, como ramificações, resíduos de arabinofuranosídeo. (2) A presença dessas ramificações é fator dificultador da hidrólise enzimática do xilano por xilanases, uma vez que elas apresentam impedimentos estruturais, de maneira que quanto mais ramificado, menor a eficiência da enzima em converter o polissacarídeo em carboidratos de baixo grau de polimerização. (2) Assim, a proposta deste trabalho é analisar o impacto da aplicação de uma arabinofuranosidase de *Bifidobacterium longum* em conjunto com xilanases para a desconstrução do xilano de bagaço de cana-de-açúcar, visando produzir xilooligossacarídeos. Estudos mostram que os xilooligossacarídeos possuem diversos impactos positivos sobre a saúde humana e animal, devido a suas extensivamente estudadas propriedades pré-biótica, anti-inflamatória, antioxidante e antibiótica. (2-3) Devido a essas propriedades, o estudo de rotas de produção desses carboidratos têm sido alvo de interesse das indústrias farmacêutica, alimentícia e de insumos pecuários.

Palavras-chave: Arabinofuranosidase. Sinergismo. Xilooligossacarídeos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 CAPETTI, C. C. M. *et al.* Recent advances in the enzymatic production and applications of xyloligosaccharides. **World Journal of Microbiology Biotechnology**, v. 37, p. 1-12, 2021. DOI: 10.1007/S11274-021-03139-7.
- 2 LEE, H. *et al.* Sugarcane wastes as microbial feedstocks: a review of the biorefinery framework from resource recovery to production of value-added products. **Bioresource Technology**, v. 376, p. 128879-1 - 128879-13, 2023. DOI: 10.1016/j.biortech.2023.128879.

3 SINGH, R. D.; BANERJEE, J.; AROA, A. Prebiotic potential of oligosaccharides: a focus on xylan derived oligosaccharides. **Bioactive Carbohydrates and Dietary Fibre**, v. 5, p. 19-30, 2015. DOI: 10.1016/j.bcdf.2014.11.003.

PG68

Coeficiente de adesão em átomos colidindo em uma superfície metálica

SILVA, Gustavo Diniz¹; OLIVEIRA, Luiz Nunes de¹

gustavodiniz0310@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Estamos interessados na taxa de adesão que acontece a partir do processo de colisão entre um átomo ou molécula e uma superfície. Esse mecanismo de adsorção é de grande importância nas áreas de Física e Química, explicando fenômenos como a catálise e corrosão.

Qualitativamente o problema pode ser descrito por um átomo, inicialmente neutro se aproximando da superfície metálica. A superposição entre os orbitais desse átomo e os da superfície cresce e possibilita transferência de carga. Quando um elétron é transferido o átomo passa a ter carga elétrica e consequentemente aparece um potencial de carga imagem, o que acelera a partícula em direção à superfície. Na colisão subsequente a geração de fônons e de pares elétron-buraco no metal rouba energia do átomo incidente, que pode ficar preso no potencial atrativo. Existe, portanto, uma probabilidade de que essa partícula seja adsorvida pela superfície. O desafio teórico é calcular essa probabilidade, que recebe o nome de coeficiente de adesão S .

A aproximação de Born-Oppenheimer, tradicionalmente empregada para separar a parte nuclear da função de onda da eletrônica, não é capaz de explicar o fenômeno. Além disso, não podemos usar aproximações adiabáticas uma vez que são justamente as não-adiabáticas que possibilitam a perda de energia do átomo. Portanto, o cálculo completo empregando tratamento numérico preciso da função de onda dependente do tempo $\Psi(z, t)$ é necessário.

A dinâmica da colisão unidimensional é descrita pela Eq. de Schrödinger,

$$i\hbar\partial_t\Psi(z, t) = \left[\frac{-\hbar^2\partial_z^2}{2M} + H^e(z) \right] \Psi(z, t),$$

onde M é a massa do átomo, z é a distância entre o átomo e a superfície e H^e é o Hamiltoniano eletrônico.

A modelagem desse problema é realizada de forma simplificada pela incidência normal de um átomo de hidrogênio, inicialmente neutro, sobre a superfície de um metal, que será descrito por uma banda de condução sem estrutura. Para descrever a parte eletrônica, empregaremos o modelo de Anderson de uma impureza com um termo extra que é o potencial de carga-imagem,

$$H^e = \varepsilon_d d^\dagger d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k (d^\dagger c_k + \text{h.c.}) + (n_d - 1)^2 \frac{W}{N} \sum_{kk'} c_k^\dagger c_{k'}. \quad (1)$$

Aqui d representa o orbital atômico, c_k os orbitais da banda, $V = V_0 e^{-rz}$ é o acoplamento entre o orbital do átomo e a banda e $W = \frac{W_0}{z_{im} + z}$ é a amplitude do potencial de carga-imagem que só aparece se o átomo for ionizado ($n_d = 0$ ou 2).

Simplificadamente o procedimento para encontrar o S baseia-se em calcular o espectro de energias

eletrônicas, utilizando o método de Grupo de Renormalização Numérico (NRG), para cada valor da distância z . (2) No estado inicial, a partícula está longe da superfície, e sua função de onda é o produto entre o estado inicial eletrônico e uma Gaussiana centrada numa posição inicial, a qual descreve a parte nuclear. O procedimento de Crank-Nicolson permite calcular a evolução temporal da função de onda, até que, depois da colisão, a função se divida em uma parte localizada perto da superfície e outra que se afasta dela. (3) A integral espacial do módulo quadrado da primeira parte determina o coeficiente de adesão S .

Palavras-chave: Coeficiente de adesão. Grupo de renormalização numérica. Colisão atômica.

Agência de fomento: CAPES (88887.495890/2020-00)

Referências:

- 1 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. **Physical Review**. v. 124, n.1, p. 41–53, 1961.
- 2 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. **Reviews of Modern Physics**. v. 80, n. 2, p. 395-450, 2008.
- 3 CRANK, J.; NICOLSON, P. "A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type", **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 43, n.1,p.50-67, 1947.

PG69

The Hidden Symmetries of Yang-Mills theory on Loop Spaces

MALAVAZZI, Henrique¹; MARTINS, Gabriel Luchini²; FERREIRA, Luiz Agostinho¹

henrique.malavazzi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal do Espírito Santo - UFES

Even though the integral form of the equations of classical electrodynamics is well known, the same does not hold for non-abelian gauge theories. In 2012, L. A. Ferreira and G. Luchini, based on concepts in loop spaces and on a generalization of the non-abelian Stokes theorem, presented an integral form of the classical Yang-Mills equations and used it to solve the long-standing problem of constructing non-abelian electric and magnetic conserved charges, for any field configurations, that are invariant under general gauge transformations. (1,2) In this poster, we present a novel symmetry of non-abelian gauge theories. It corresponds to an infinite symmetry group of the integral Yang-Mills equations, where the group elements are holonomies of connections on loop space. It differs from the usual holonomy group in the sense that its product law defines a composition of connections on every loop, and not a composition of loops. (3) In addition, the integral Yang-Mills equations are equivalent to a zero curvature condition for a connection on loop space, and that group constitutes the group of gauge transformations of those flat connections.

Palavras-chave: Symmetry. Gauge. Yang-Mills.

Agência de fomento: FAPESP (2021/10141-7)

Referências:

1 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G. Gauge and integrable theories in loop spaces. *Nuclear Physics B*, v. 858, n.2, p.336-365, May 2012.

2 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G. Integral form of Yang-Mills equations and its gauge invariant conserved charges. *Physical Review D*, v.86, n.8, p.085039-1-085039-22, Oct. 2012.

3 NAKAHARA, M. **Geometry and topology and physics**. 2nd. Boca Raton: CRC Press, 2003. 596 p.

PG70

Aplicação de RNN/ELM para extração de características de sequências de PNRG

BRUNO, Odemir Martinez¹; RODRIGUES, Naruna Esselin¹

naruna@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Os primeiros indícios do entendimento da presença de eventos aleatórios remonta à dinastia chinesa do imperador Fu Xi, e desde então com o passar dos séculos é um tópico ao qual se busca ter uma certa compreensão. (1) Dito isso, hoje é possível dividir a aleatoriedade em categorias, entre elas tem-se os geradores de números aleatórios verdadeiros (TRNG), que são produzidos por fontes não determinísticas (como processos físicos quânticos) em que não há uma dependência entre eventos consecutivos e nem uma distribuição de probabilidade conhecida. A outra categoria são os geradores de números pseudo aleatórios (PRNG), que são gerados de forma determinística, mas que os números gerados por essas fontes possuem propriedades de números aleatórios verdadeiros, em geral, tal gerador possui um ciclo de duração bem como uma semente, que garantirá que com a mesma semente a mesma sequência será gerada. (2) Há diversos geradores de PRNGs, mas aqui a ênfase é dada nos mapas k-logísticos, que possuem seu alicerce na teoria do caos. Além disso, espera-se que uma sequência de números pseudo-aleatórios possa se passar por uma sequência de números aleatórios verdadeira, por isso, é necessário realizar uma bateria de testes (como o NIST e o DIEHARD), para saber se essas sequências é formada por bits aleatórios independentes, cada um assumindo o valor 0 ou 1 com probabilidades iguais independentemente dos outros ou não. Por outro lado, mesmo com os testes de aleatoriedade não é possível escanear todas as características da sequência, de tal forma que, não há como afirmar se em algum momento a sequência apresenta um padrão ou não. Portanto, o trabalho aqui apresentado tem como objetivo modelar uma sequência de PNRGs (gerados por um mapa k-logístico) em grafos, na tentativa de encontrar alguma característica ou padrão relevante. Isso porque as redes complexas são amplamente utilizadas na criação de descritores no reconhecimento de padrões. (3) Ademais, nesse trabalho em específico, busca-se utilizar uma abordagem de aprendizado de máquina (RNN/ELM) que foi proposta como uma alternativa eficiente para treinar redes neurais de uma única camada oculta, numa tentativa de encontrar algum padrão ou característica relevante no que diz respeito a uma sequência de números pseudo aleatórios.

Palavras-chave: Reconhecimento de padrões. Redes complexas. Aprendizado de máquina.

Agência de fomento: CNPq (140549/2022-6)

Referências:

1 ALVES, M. L. **Classification of pseudo-random number generators by complex networks and computational geometry analysis**. 2019. 152 p. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019. Disponível em: <https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/55/55134/tde-06012020-171245/>. Acesso em: 07 jul.

2023.

2 JUSTO, M. J. M. **Padrões e pseudo-aleatoriedade usando sistemas complexos**. 2017. 198 p. Tese (Doutorado) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017. Disponível em: <http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76132/tde-28022018-144846/>. Acesso em: 07 jul. 2023.

3 RIBAS, L. C. **Aprendizado de representações e caracterização de redes complexas com aplicações em visão computacional**. 2021. 228 p. Tese (Doutorado) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021. Disponível em: <https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/55/55134/tde-03032022-083354/>. Acesso em: 07 jul. 2023.

PG71

Desenvolvimento de sistema aplicado à Agricultura de Precisão para classificação de plantas de soja e plantas daninhas utilizando Visão Computacional e imagens multiespectrais

CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹; ODA, Yuri Sarreta¹

yuri.oda@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, a Agricultura de Precisão destaca-se como uma das áreas mais promissoras para o desenvolvimento de tecnologias no Brasil. Algumas tecnologias advindas dessa área incluem, por exemplo, o mapeamento de áreas de produtividade e o desenvolvimento de sensores para análises do solo, visando o uso inteligente dos recursos durante o manejo das lavouras e auxiliando o produtor durante as etapas de tomada de decisão. (1) Dentre os problemas da agricultura moderna está o uso intensivo e não localizado de herbicidas que, além de ser prejudicial ao meio ambiente, contribui para altos custos para o produtor e resulta na aplicação de produtos em organismos não desejados. (2) Visando contornar este problema, o presente projeto visa, através de métodos de Visão Computacional e Inteligência Artificial (IA), o desenvolvimento de um sistema capaz de obter imagens de plantas em diferentes comprimentos de onda, construir imagens multiespectrais e classificar as plantas presentes nas imagens em plantas de soja ou plantas daninhas para posterior aplicação de herbicidas apenas nas plantas daninhas detectadas. Para a obtenção de imagens de plantas de soja e plantas daninhas em condições de campo, foi realizado um experimento em uma lavoura de soja na região de São Carlos para construção de um banco de imagens multiespectrais. O equipamento utilizado para captura das imagens multiespectrais foi desenvolvido utilizando um computador embarcado Advantech MIO2360, um módulo contendo uma câmera CMOS RGB e uma câmera CMOS monocromática com filtro passa-banda no comprimento de onda do infravermelho próximo (NIR 800-900 nm), um suporte para estabilizar o processo de captura, uma bateria 12 V para alimentação do sistema e uma carenagem impressa em uma impressora 3D. A construção do banco de imagens ocorreu durante a Safra 2022/23 e foram capturadas 10.000 imagens RGB e as respectivas 10.000 imagens NIR através do posicionamento do sistema de captura paralelo às linhas de plantio da soja. O processo de rotulação das imagens foi realizado utilizando o software CVAT (do inglês, *Computer Vision Annotation Tool*), as imagens foram divididas nos subsets treino, validação e teste na proporção 60:20:20 e o algoritmo YOLO em sua versão v5 foi utilizado para treinar dois modelos para as tarefas de detecção e classificação de plantas daninhas e plantas de soja, sendo um para as imagens RGB e outro para as imagens NIR. Os resultados obtidos para as métricas *Precision* e *Recall* foram 0,772 e 0,726, respectivamente, para a banda RGB e 0,733 e 0,735 para a banda NIR, demonstrando que o algoritmo foi capaz de detectar e classificar as plantas com acurácia suficiente nestas etapas iniciais. Além disso, os resultados para a métrica mAP(0,5) foram 0,800 e 0,782 para as bandas RGB e NIR, respectivamente, sugerindo que as imagens espectrais de vegetação no comprimento de onda do infravermelho desempenham um papel importante como complemento para as imagens RGB na área de detecção de plantas por imageamento.

Palavras-chave: Agricultura de precisão. Manejo de plantas daninhas. Imagens multiespectrais

Agência de fomento: CAPES (88887.608664/2021-00)

Referências:

- 1 ELI-CHUKWU, N. C. Applications of artificial intelligence in agriculture: a review. **Engineering, Technology & Applied Science Research**, v. 9, n. 4, p. 4377-4383, 2019.
- 2 SMITH, M. J. Getting value from artificial intelligence in agriculture. **Animal Production Science**, v. 60, n. 1, p. 46–54, 2020.

PG72

Geometria clássica em Grassmannianas

FERREIRA, Carlos Henrique Grossi¹; PINTO, Diogo de Oliveira Soares²; MAGNO, Gabriel Fukamoto²
gabriel.magno@usp.br

¹Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos - ICMC; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

No contexto de espaços lineares munidos de forma hermitiana não-degenerada com assinatura bem definida, vamos apresentar a geometria de grassmannianas permitindo estabelecer uma relação entre a geometria projetiva (pseudo-)riemanniana da porção regular e a estrutura conforme do absoluto. (1-2). Especificamente, iremos comentar sobre a estrutura conforme usual no absoluto do espaço de Sitter e a estrutura causal no absoluto do espaço anti-de Sitter. Futuramente, a intenção é formular a correspondência AdS/CFT nesta linguagem com o objetivo de avaliar, para esta correspondência, o papel das ferramentas geométricas disponíveis na teoria de geometrias clássicas.

Palavras-chave: Geometrias clássicas. Grassmannianas. Geometria projetiva

Agência de fomento: CAPES (88887.499857/2020-00)

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. **Advances in Applied Clifford Algebras**, v. 29, n. 1, p. 1-10, 2019.

PG73

Reservoir computing: using conjugated polymers for constructing physical reservoirs

FARIA, Gregório¹; TORRES, Bruno Bassi Millan¹; SOUZA, Rafael Francisco Santiago de¹

rafael.francisco.sousa@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Reservoir computing is a concept that emerged in the early 2000s which consists of using nonlinear dynamics of physical systems (reservoir) as a neural network. However, unlike a classical neural network, where each element of the network needs to be pre-trained, the elements of the non-classical reservoir functioning in a untrained fashion. The reservoir uses the non-linear dynamics of its elements to propagate information and only the output layer of the reservoir is trained to fit the desired regression/classification. (1) In this work, we evaluated the construction of physical reservoirs based on electropolymerized conducting polymers microfibers based on EDOT, pyrrole and aniline derivatives. We found that EDOT microfibers were easily growth by using a square voltage with amplitudes between 2 and 10 V, and frequencies ranging from 10 to 200Hz. As for the Aniline, o-Anisidine and pyrrole, there is no growth in any of the tested conditions. After sorting the monomers, the physical reservoir was built by placing a monomeric solution in contact with several gold electrodes and applying a sinusoidal voltage so that the polymeric fibers grow and connect to the electrodes. The physical reservoirs obtained with EDOT were characterized for varied dynamical responses and nonlinear transformations. Beyond that, we also aimed to test single fiber EDOT reservoirs to analyze how the single element of a reservoir (a fiber) interacts with signals coming from other sources, with the aim to quantify the electrical resistance variance of the fiber to see the electrical changes in the input signal related to the output signal, analyzing if the single fiber is enough to distinguish between two signals and perform some sort of simple data classification. References [1] Nakajima, Kohei & Hauser, Helmut & Li, Tao & Pfeifer, Rolf. (2015). Information processing via physical soft body. Scientific reports. 5. 10487. 10.1038/srep10487.

Palavras-chave: Reservoir. Computing. Polymer

Agência de fomento: CAPES (88887.495882/2020-00)

Referências:

1 NAKAJIMA, K. *et al.* Information processing via physical soft body. **Scientific reports**, v.5, p.10487-1-10487-11, 2015.

PG74

Uso do vírus psudotipado SARS-CoV-2 para estudos da ação de derivados de Bothropstoxin-I como inibidor de entrada viral

GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹; CAMARGO, Gabriela Missurini de¹

gabriela.missurini.camargo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Nos últimos 20 anos, testemunhamos quatro surtos de coronavírus: SARS (síndrome respiratória aguda grave, 2002 e 2003), MERS (síndrome respiratória do Oriente Médio, desde 2012) e agora Covid-19 (desde 2019). Evidências científicas sugerem que os coronavírus surgirão novamente no futuro, potencialmente representando uma ameaça existencial. Por isso, cientistas buscam entender a fisiopatologia desses vírus e descobrir métodos de tratamento e diagnóstico para a atual pandemia, bem como para outras pandemias que podem acontecer no futuro. Neste momento, temos pouca compreensão do universo dos coronavírus endêmicos e potencialmente emergentes, depender do desenvolvimento de novas vacinas para lidar com cada mutação mais complexa que aparece não pode ser a única solução, exigindo atenção urgente para encontrar novas estratégias que possam contribuir para a prevenção da propagação viral através da inativação de vírus em superfícies, aerossóis e corpo humano. Nesse contexto, diferentes estratégias têm sido estudadas e mais especificamente em nosso grupo de pesquisa, as baseadas em luz têm sido utilizadas como ferramentas para inativar o vírus, tornando-as recursos promissores contra a pandemia de COVID-19. (1) Em nossos laboratórios desenvolvemos um modelo pseudotipado de SARS-CoV-2 com o objetivo de estudar os mecanismos de inativação fotodinâmica do vírus (PDI) através do uso de fotossensibilizador. O mecanismo de inativação viral através de PDI baseado em fotossensibilizador de fotoditazina (PDZ) foi estudado em partículas pseudovirais que abrigam o gene repórter Luciferase-IRES-ZsGreen. (1-2) O tratamento com PDZ pode danificar a proteína spike do vírus, desativando a expressão do gene repórter da luciferase em células infectadas por vírus foto-inativados. Observamos que as células expostas ao vírus tratadas com PDZ foram incapazes de expressar o gene repórter da luciferase, ou seja, não conseguiram entrar nas células, comprovando a inativação viral apesar da presença de genes intactos de RNA e DNA. (2) A partir deste resultado, nos propusemos a tentar então desativar a entrada viral com outros mecanismos que estavam sendo estudados, como os peptídeos diméricos não tóxicos derivados da bothropstoxina-I (BthTX - I), que é uma miotoxina isolada do veneno da cobra jararacussu, homóloga à Fosfolipase A2 (PLA2). Embora não seja cataliticamente ativa, a região C-terminal da toxina mostrou efeitos antimicrobianos, aparecendo como uma proposta também a desativação viral, já que eles já foram utilizados em outros estudos e diminuíram consideravelmente a atividade de PLpro, que é responsável pela clivagem e processamento de poliproteínas virais, reconhecendo os motivos tetrapeptídicos LXGG localizado na poliproteína viral pp1a e hidrolisando a ligação peptídica, liberando assim as proteínas nsp1, nsp2 e nsp3. (3) Desta forma investigamos se também há alguma atividade destes peptídeos nos mecanismos de entrada viral do coronavírus, para posteriormente também testá-los junto com terapia fotodinâmica, em busca de estratégias ainda mais eficientes. (2-3)

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Inativação fotodinâmica. Peptídeos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 CRAWFORD, K. H. D. *et al.* Protocol and reagents for pseudotyping lentiviral particles with SARS-CoV-2 spike protein for neutralization assays. **Viruses**, v. 12, n. 5, p. 513, May 2020. DOI: 10.3390/v12050513.
- 2 SADRAEIAN, M. *et al.* Study of viral photoinactivation by UV-C light and photosensitizer using a pseudotyped model. **Pharmaceutics**, v. 14, n. 3, p. 683, Mar. 2022. DOI: 10.3390/pharmaceutics14030683.
- 3 FREIRE, M. C. L. C. *et al.* Non-toxic dimeric peptides derived from the Bothropstoxin-I are potent SARS-CoV-2 and papain-like protease inhibitors. **Molecules**, v. 26, n. 16, p. 4896, Aug. 2021. DOI: 10.3390/molecules26164896.

PG75

Cooperação na evolução pré-biótica: seleção de grupos

FONTANARI, José Fernando¹; ARAUJO, João Marcos Rigon¹

joao_araujo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos problemas fundamentais em evolução pré-biótica é explicar a coexistência de moléculas auto-replicadoras distintas, condição necessária para o surgimento e estabilização de aglomerados moleculares suficientemente complexos capazes de codificar (ou mesmo atuar sobre) um metabolismo rudimentar. Modelos clássicos de evolução pré-biótica, como o modelo de quase-espécies, não permitem esse tipo de coexistência: apenas o replicador mais eficiente e seus mutantes estruturalmente similares sobrevivem. Uma solução para isso é a introdução de elementos cooperativos na dinâmica de interação molecular, originalmente puramente competitiva, levando aos ciclos moleculares catalíticos, denominados hiperciclos. Nesse sentido, o objetivo desse projeto foi de estudar a dinâmica de interação entre moléculas auto-replicadoras usando mecanismos de cooperação, para isso é necessário a familiarização de conceitos de teoria de jogos aplicados na dinâmica de sistemas evolucionários (*Nowak 2006*. e o estudo da análise de estabilidade de sistemas não-lineares dado o efeito cooperativo e às taxas de crescimento intrínseco de cada auto-replicador, conforme introduzido por *Michod (1983)*. (1-2) Além disso, será mostrado como a dinâmica é facilitada em uma população estruturada na distribuição das macromoléculas associadas à replicação, de forma que será feita análises mais aprofundadas para as distribuições binomial e de Polya, estudando seus efeitos de forma analítica e computacional.

Palavras-chave: Replicadores. Origem da vida. População estruturada.

Agência de fomento: CNPq (155655/2022-1)

Referências:

- 1 NOWAK, M.A. **Evolutionary dynamics**: exploring the equations of life. New York: Belknap Press, 2006.
- 2 MICHOD, R.E. Population biology of the first replicators: on the origin of the genotype, phenotype and organism. **American Zoologist**, v. 23, n. 1, p. 5-14, 1983.

PG76

Princípio variacional, segunda lei e simulação de temperatura em condensados de Bose-Einstein espinoriais

MUNIZ, Sergio Ricardo¹; DONATO, Mário Henrique Figlioli¹

mario.donato@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho exploro maneiras de escrever *teoremas de flutuação em condensados de Bose-Einstein espinoriais* no regime de campo clássico. (1-2) Os teoremas de flutuação são ferramentas importantes para descrever propriedades universais de flutuações de sistemas fora de equilíbrio. (3) Esses teoremas aplicados à sistemas quânticos são importantes, uma vez que são capazes de descrever propriedades termodinâmicas desses sistemas. Por exemplo, as relações de *Jarzynski* e *Crooks* e a desigualdade trabalho-energia livre. (3) Em particular, discuto como o princípio variacional do parâmetro de ordem de um condensado carrega informações acerca da segunda lei da termodinâmica e mostro uma maneira de simular temperatura em sistemas condensados a partir de um potencial externo com uma chave seletora quântica de caminho (i.e., os possíveis caminhos estão associados a estados quânticos ortonormais de um sistema acoplado externo; mais detalhes na apresentação). Além disso, mostro que existe uma desigualdade análoga à segunda lei da termodinâmica para a temperatura simulada.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstein espinoriais. Teoremas de flutuação. Simulação de temperatura.

Agência de fomento: CAPES (88887.616990/2021-00)

Referências:

- 1 KAWAGUCHI, Y.; UEDA, M. Spinor Bose-Einstein condensates. **Physics Reports**, v. 520, n. 5, p. 253-381, 2012.
- 2 DONATO, M. H. F. **Excitações topológicas em condensados de Bose-Einstein espinoriais**. 2021. Dissertação (Mestrado em Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.
- 3 ESPOSITO, M.; HARBOLA, U; MUKAMEL, S. Nonequilibrium fluctuations, fluctuation theorems, and counting statistics in quantum systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 4, p. 1665-1702, 2009.

PG77

Descoberta de derivados nitrofurânicos como inibidores de *Plasmodium falciparum*

MALUF, Sarah El Chamy¹; SOUZA, Guilherme Eduardo de¹; GUIDO, Rafael Victório Carvalho¹; BARONI, Adriano Cesar de Moraes²; MOURA, Igor Mota Rodrigues de¹; RIGO, Camila Fonseca Silva¹; MENDES, Giovana Rossi¹

camila.rigo@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal do Mato Grosso do Sul - UFMS

A malária é uma doença tropical transmitida por mosquitos fêmeas do gênero *Anopheles* infectados com protozoários do gênero *Plasmodium*. Este trabalho concentra-se no *Plasmodium falciparum*, responsável pela forma mais grave da doença e presente em regiões endêmicas. Observou-se recentemente o surgimento de resistência às terapias de combinação com derivados de artemisinina (ACTs), que são a primeira linha de defesa contra o *P. falciparum*, assim como a disseminação de parasitas resistentes a outros antimaláricos convencionais, como cloroquina e atovaquona, além da artemisinina. O objetivo deste trabalho foi descobrir inibidores de cepas sensíveis e resistentes do parasita *P. falciparum* como compostos líderes para o desenvolvimento de novos fármacos antimaláricos. Os compostos investigados foram derivados nitrofurânicos, que têm sido estudados por sua ação contra agentes causadores de doenças tropicais, como Leishmaniose, Doença de Chagas e malária. Entre os 65 compostos avaliados, os dados experimentais de triagem biológica indicaram que 39 apresentaram atividade antiplasmodial significativa ($IC_{50P.falc} \leq 10 \mu M$). Os ensaios de determinação da citotoxicidade indicaram que 8 (JO04, JO29, JO4, JO9, J21, J40, J41 e J42) desses 39 compostos apresentaram baixo efeito tóxico em células de hepatocarcinoma humano (HepG2). O índice de seletividade ($IS = IC_{50HepG2}/IC_{50P.falc}$) calculado para esses 8 compostos mostraram resultados adequados ($IS > 10$) para o desenvolvimento da série química. Para complementar os dados obtidos, os compostos com maiores valores de IS (JO29 e J42) estão sendo avaliados contra um painel de cepas resistentes de *P. falciparum*. Os resultados obtidos indicam que a série de derivados nitrofurânicos é atrativa para o desenvolvimento de novos candidatos a compostos líderes para a malária. (1-3)

Palavras-chave: Malária. Antimaláricos. *Plasmodium falciparum*.

Agência de fomento: CAPES (88887.823283/2023-00)

Referências:

- 1 TREFZGER, O. S. *et al.* Design, synthesis, antileishmanial, and anti-fungal biological evaluation of novel 3,5-disubstituted isoxazole compounds based on 5-nitrofurans scaffolds. **Archiv der Pharmazie**, v. 353, n. 2, p. 1900241. Fev. 2020. DOI: 10.1002/ardp.201900241
- 2 SANTOS, M. B. S. Atividade anti-Trypanosoma cruzi de derivados do 5-nitrofurano e algumas características de seu modo de ação. Dissertação (Mestrado em Biologia da Relação

Patógeno-Hospedeiro) - Instituto de Ciências Biomédicas, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. DOI: 10.11606/D.42.2018.tde-10032023-170640.

3 BRASIL. Ministério da Saúde. **Malária**. Brasília, 2023. Disponível em: <https://www.gov.br/saude/pt-br/assuntos/saude-de-a-a-z/m/malaria>. Acesso em: 06 jul 2023.

PG78

Development and characterization of nanoporous materials using cryoporometry and nuclear magnetic resonance techniques

TREBBI, Bruno¹; AZEVÊDO, Eduardo Ribeiro de¹; GARCIA, Rodrigo Henrique¹; FILGUEIRAS, Jefferson Gonçalves²

brunotrebbi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Universidade Federal Fluminense - UFF

Time domain NMR (TDNMR) is one of the most effective methods for porous media characterization. While pores with dimensions in the range of hundreds of nm to tens of μm can be characterized by various NMR-TD techniques based on relaxation and molecular diffusion, pores with dimensions in the range of tens to hundreds of nm can be characterized using the so-called cryoporometry techniques. (1) In general, cryoporometry explores variations in the melting temperatures of fluids confined in nanoscale spaces, which can be characterized by monitoring the emergence or (disappearance) of the NMR signal from a liquid phase as a function of temperature. This is usually achieved using a standard spin echo pulse sequence. (2) We present an alternative approach to perform NMR-cryoporometry experiments using dipolar echoes pulse sequences. By combining a dipolar echo pulse sequence, such as mixed Magic Sandwich Echoes (mixed MSE), with dipolar filters, such as spin echo or Goldman-Shen, the signals from the full, solid + liquid, and the liquid phase can be obtained almost simultaneously. (3) This makes possible to calculate the fraction of the liquid phase at a given temperature directly from the signal intensities, i.e., without the need of an extra experiment for correcting the temperature dependence of the magnetization with temperature, as in the spin echo-based experiments. The approach was tested in controlled pore glasses (CPG) of different pores sizes, using water and *tert* butanol as probe fluids. In comparison with the experiments performed with standard spin echo, the dipolar echo approach presented some advantages such as faster execution and processing time, easier determination of the temperature range and conditions for avoiding the appearing of supercooled fluid at low temperatures. Additionally, we will show some applications of the approach to characterize mesopore distribution in materials such as porous biopolymers, natural biomass and soils. FAPESP, CAPES, CNPQ (grant 308760/2022-0)

Palavras-chave: TD-NMR. Cryoporometry. Porous medium.

Agência de fomento: CAPES (88887.839183/2023-00)

Referências:

- 1 MITCHELL, J.; WEBBER, J. B. W.; STRANGE, J. H. Nuclear magnetic resonance cryoporometry. **Physics Reports**, v. 461, n. 1, 2008. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.02.001.
- 2 PETROV, O. V.; FURÓ, I. NMR cryoporometry: principles, applications and potential. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 54, n. 2, p. 97-122, 2009.

3 FILGUEIRAS, J. G. *et al.* Dipolar filtered magic-sandwich-echoes as a tool for probing molecular motions using time domain NMR. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 285, p. 47-54, Dec. 2017. DOI: 10.1016/j.jmr.2017.10.008.

PG79

Second-order density correlations for characterizing non-equilibrium quantum systems

MADEIRA, Lucas¹; ARMIJOS, Michelle Alejandra Moreno¹; TELLES, Gustavo Deczka¹; MACHADO, Leandro Alvares¹; FRITSCH, Amilson¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; OROZCO, Arnol Daniel García¹

michelle.moreno@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work, we study two-point density correlations in measurements of freely expanding out-of-equilibrium Bose-Einstein condensates. Density fluctuations arise during the excitation process and are distributed throughout the cloud during the relaxation time in the harmonic trap. By imaging the sample after expansion and inspecting the fluctuations in the detected light, we derive correlations in the momentum space and compare the results with simulations. (1) In a non-excited sample, the correlation function shows $c(\Delta k) \approx 1$, exhibiting its coherent nature. For short distances, it shows $c(\Delta k) > 1$; this is simply the matter-wave analog of the celebrated Hanbury Brown and Twiss effect of photon "bunching". (2) An additional and counterintuitive effect appears in the correlation function: an anticorrelation dip $c(\Delta k) < 1$ at separated points. This effect originates from the strong mutual repulsion between atoms and is also related to the anisotropy of the trap. (3) Analyzing the correlation function, we noticed that its maximum value $c(0)$ varies with the excitation amplitude injected into the sample and evolves during the relaxation time; therefore, it is a good indicator of the evolution of the cloud out of the equilibrium. Our study can be expanded and deepened to answer fundamental questions about equilibration or thermalization in non-equilibrium quantum systems.

Palavras-chave: Non-equilibrium. Bose-Einstein condensate. Density correlations.

Agência de fomento: CAPES (88887.643259/2021-00)

Referências:

- 1 ALTMAN, E.; DEMLER, E.; LUKIN, M. D. Probing many-body states of ultracold atoms via noise correlations. **Physical Review A**, v. 70, n. 1, p. 013603-1- 013603-4, July 2004.
- 2 SCHELLEKENS, M. *et al.* Hanbury Brown Twiss effect for ultracold quantum gases. **Science**, v. 310, n. 5748, p. 648-651, October 2005.
- 3 PERRIN, A. *et al.* Hanbury Brown and Twiss correlations across the Bose-Einstein condensation threshold. **Nature Physics**, v. 8, n. 3, p. 195-198. Mar. 2012.

PG80

Estudo do mecanismo de inibidores da entrada viral e ensaio de neutralização por pseudovírus SARS-CoV-2 em laboratório BSL2

PINTO JUNIOR, Fabio Francisco¹; MIRANDA, Marcela¹; SADRAEIAN, Mohammad²; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹

fabiojr@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²University of Technology Sydney

Diferentes estratégias baseadas em luz foram investigadas para inativar vírus. Aqui, desenvolveu-se um modelo pseudotipado baseado em HIV de SARS-CoV-2 (SC2) para estudar os mecanismos de inativação do vírus usando duas estratégias diferentes; fotoinativação (FI) por luz UV-C e inativação fotodinâmica (IFD) com o fotossensibilizador fotoditazina (PDZ). Usou-se duas partículas pseudovirais que abrigam o gene repórter Luciferase-IRES-ZsGreen com um pico do SARS-CoV-2 na membrana ou sem spike como um pseudovírus naked control. O mecanismo de inativação viral por UV-C e PDI baseado em PDZ foram estudados por meio de caracterizações bioquímicas e PCR quantitativo em quatro níveis; danos virais de células livres; entrada de células virais; integração de DNA; e expressão de genes repórteres. Os tratamentos UV-C e PDZ podem destruir o RNA de fita simples (ssRNA) e a proteína spike do vírus, com proporções diferentes. No entanto, o vírus ainda foi capaz de se ligar e entrar nas células HEK 293T que expressam a enzima conversora de angiotensina 2 (ACE-2). Uma maneira dependente da dose de irradiação UV-C danifica principalmente o ssRNA, enquanto a IFD baseada em PDZ destrói principalmente o pico e a membrana viral em concentração e maneiras dependentes da dose. Observou-se que as células infectadas pelo vírus e tratadas com UV-C ou PDI à base de PDZ não expressaram o gene repórter da luciferase, significando a inativação viral, apesar da presença de genes de RNA e DNA intactos. Uma maneira dependente da dose de irradiação UV-C danifica principalmente o ssRNA, enquanto a PDI baseada em PDZ destrói principalmente o spike e a membrana viral em concentração e maneiras dependentes da dose. Observamos que as células infectadas pelo vírus e tratadas com UV-C ou PDI à base de PDZ não expressaram o gene repórter da luciferase, significando a inativação viral, apesar da presença de genes de RNA e DNA intactos. Uma maneira dependente da dose de irradiação UV-C danifica principalmente o ssRNA, enquanto a PDI baseada em PDZ destrói principalmente o pico e a membrana viral em concentração e maneiras dependentes da dose. Observamos que as células infectadas pelo vírus e tratadas com UV-C ou PDI à base de PDZ não expressaram o gene repórter da luciferase, significando a inativação viral, apesar da presença de genes de RNA e DNA intactos. (1-2)

Palavras-chave: Viral inactivation. Photodynamic inactivation. SARS-CoV-2.

Agência de fomento: CAPES (88887.511685/2020- 00)

Referências:

1 SADRAEIAN, M. *et al.* Study of viral photoinactivation by UV-C light and photosensitizer

using a pseudotyped model. **Pharmaceutics**, v. 14, n. 3, p. 683, Mar. 2022. DOI: 10.3390/pharmaceutics14030683

2 CRAWFORD, K. H. D. *et al.* Protocol and reagents for pseudotyping lentiviral particles with SARS-CoV-2 Spike protein for neutralization assays. **Viruses**, v. 12, n. 5, p. 513, May 2020.

PG81

Optical strategies for the treatment of cutaneous melanoma

JASINEVICIUS, Gabriel Oliveira¹; BUZZÁ, Hilde Harb²; MORIYAMA, Lilian Tan¹; KURACHI, Cristina¹; CHEN, Juan³; ZHENG, Gang³; MARTINELLI, Letícia Palombo¹; TOVAR, Johan Sebastián Díaz¹

leticia.martinelli@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Pontificia Universidad Catolica de Chile - UC; ³University of Toronto - U of T

Melanoma is the most aggressive type of skin cancer and a major health problem. Even with a low incidence, it has a high mortality rate when not diagnosed at local stage. (1) The standard treatment is surgery and for advanced stages, treatments such as chemotherapy, radiotherapy and immunotherapy are only palliative. There is a need, therefore, to develop new therapeutic options. In the case of cutaneous melanoma, therapies that use light in the wavelength of visible light show a poor response due to the limitation of light penetration into the tumor caused by melanin. In this study, the effect of a indocyanine green nanoemulsion (NanoICG) was evaluated in an animal model for the treatment of cutaneous melanoma, using photothermal therapy (PTT) with irradiation at 808 nm and its association with optical clearing agents (OCAs). PTT is a technique based on the use of a compound called photosensitizer (PS) and light at a suitable wavelength for its activation. Upon gaining energy from light, the PS goes to an excited state and returns to the ground state, releasing heat. (2) This localized temperature rise can cause cell damage and even death. OCAs decrease attenuation in tissues causing light to reach deeper into the tissue, increasing response to therapy. (3) Different doses of light and concentrations of the molecule were tested, in addition to intratumoral and systemic administration. Experiments were also carried out with the same B16F10 cell line, but with two different phenotypes: one had greater melanin production while the other less. Optical properties of the tumors were also taken, such as diffuse reflectance, to better understand the response to treatment in these two conditions. The group with intratumoral administration and with less pigmented cells showed a better response to PTT, in which 66% of the animals had complete reduction of the lesion within 14 days. Macroscopic response and histological analyses are performed to evaluate the PTT response. PTT with more pigmented cells showed total or partial tumor reduction in 57% of the animals. Kaplan-Meier curves for animal survival are also compared for the investigated protocols, in which animals with less pigmented tumors survived up to approximately 30 days and with more pigmented tumors more than 50 days. The groups with OCAs are being held.

Palavras-chave: Melanoma. Optical clearing agents. Photothermal therapy.

Agência de fomento: CAPES (88887.513082/2020-00)

Referências:

1 PINHEIRO, A. M. C. *et al.* Melanoma cutâneo: características clínicas, epidemiológicas e histopatológicas no Hospital Universitário de Brasília entre janeiro de 1994 e abril de 1999. **Anais**

Brasileiros de Dermatologia, v. 78, n. 2, p. 179-186, Abr. 2003.

2 NIEMZ, M. **Laser-tissue interactions: fundamentals and applications**. 2nd rev. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2002. (Biological and Medical Physics Series).

3 MILLON, S. R. *et al.* Effect of optical clearing agents on the in vivo optical properties of squamous epithelial tissue. **Lasers in Surgery Medicine**, v. 38, n. 10, p. 920-927, 2006.

PG82

Purificação quântica para incluir ruído ambiental na investigação do conceito de complexidade quântica

MONTEIRO, Gabriel Nogueira Audi¹; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹

gabriel.nogueira.monteiro@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Neste trabalho, estudamos a dinâmica de um sistema quântico aberto de n qubits ruidosos e não interagentes, em que cada qubit interage com um campo bosônico externo diferente, com uma interação de defasagem pura. (1) Através da purificação quântica, encontramos uma dinâmica efetiva que substitui a interação dos qubits com os campos bosônicos por uma interação com qubits auxiliares. (2) No caso de um qubit, também mostramos como adequar a dinâmica efetiva obtida para incluir termos de controle, que representam as operações para eliminar o ruído. Essa adaptação foi realizada na aproximação de Born e considerando um regime em que o operador de evolução temporal para a parte do sistema varia lentamente em relação à dinâmica ruidosa. Por fim utilizamos a dinâmica efetiva, que emula os efeitos ruído, para estudar o problema de um ponto de vista geométrico, explorando duas geometrizações distintas no grupo de Lie especial unitário $SU(2^N)$. Na primeira geometrização, consideramos a métrica usual da complexidade quântica, que penaliza operações envolvendo 3 ou mais qubits no Hamiltoniano, onde as geodésicas para o problema são dadas por geodésicas de Pauli. (3) Na segunda geometrização, encontramos uma geometria na qual a curva geodésica coincide com a trajetória realizada pelo operador unitário efetivo. Para isso, introduzimos uma função custo dada por uma Lagrangiana que depende explicitamente do tempo.

Palavras-chave: Descoerência quântica. Purificação quântica. Complexidade quântica.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. Oxford: Oxford University Press, 2007. ISBN: 9780199213900.
- 2 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**. 10th anniversary edition. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. ISBN: 9781107002173.
- 3 NIELSEN, M. A. *et al.* Quantum computation as geometry. **Science**, v. 311, n. 5764, p. 1133-1135, 2006.

PG83

Estudo de nanotermodinâmica com moléculas e fótons

ALVARENGA, Larissa Nolasco de Carvalho¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹

larissa.nolasco@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A termodinâmica é uma teoria física consolidada, criada para entender as transformações da matéria e a relação entre energia, calor e trabalho. No entanto, ao lidar com sistemas de pequena escala que não estão em equilíbrio, especialmente no contexto quântico, ela apresenta limitações. (1) O estudo da termodinâmica em sistemas pequenos, como átomos e moléculas, procura estender seus conceitos tradicionais, levando em consideração flutuações de origem térmica e/ou quântica que são fundamentais e não podem ser ignorados nesta escala. (2) Neste trabalho, exploraremos um novo modelo experimental. Este modelo descreve o balanço energético de uma molécula sob excitação óptica, do ponto de vista da primeira lei da termodinâmica. A molécula em questão sofre uma mudança em sua configuração espacial ao absorver e emitir fótons. (3) Essa análise permitirá realizar a calorimetria em uma única molécula através da sua interação com a luz.

Palavras-chave: Termodinâmica estocástica. Processos fora do equilíbrio. Óptica quântica.

Agência de fomento: CNPq (130764/2023-0)

Referências:

- 1 SEIFERT, U. Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines. **Reports on progress in physics**, v. 75, n. 12, p. 126001, 2012.
- 2 SANTOS, T. F. F. **Óptica quântica aplicada à termodinâmica quântica**. 2019. 67 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2019.
- 3 HALPERN, N. Y.; LIMMER, D. T. Fundamental limitations on photoisomerization from thermodynamic resource theories. **Physical Review A**, v. 101, n. 4, p. 042116, 2020.

PG84

Deep Variational Anomaly Generation: An Approach to Testing Molecular Representation Robustness

NOGUEIRA, Victor¹; SHARMA, Rishabh²; KEISER, Michael²; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho¹

victor.nogueira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²University of California - UC

Real-world datasets in various domains, ranging from telecommunications to healthcare, often contain anomalous or outlier data that deviate significantly from the norm. Before applying modeling techniques, it is essential to filter out these anomalies to ensure data quality. This requirement has led to the development of robust anomaly detection models that can be deployed for data cleaning or to raise alarms in dynamic information processing systems, such as browsing, spam detection, or credit card fraud detection. However, there are cases where anomalies are the focus of investigation, shifting the attention from anomaly detection to anomaly generation. In certain domains, anomaly detection models face limitations due to the scarcity of training data, which hinders their predictive potential. In such situations, generating anomalies to populate synthetic training datasets has emerged as a promising approach to address data scarcity. (1) To tackle this challenge, it is crucial to investigate advanced methods for testing the robustness of molecular representations. In this context, we highlight the need for exploring advanced representational robustness testing methods in conjunction with the progress made in maximizing molecular representation robustness. We propose leveraging deep learning techniques, specifically variational autoencoders (VAE), to generate anomalies in a recently developed molecular string representation called SELF-referencing Embedded Strings (SELFIES). (2-3) The objective was to test the robustness of the SELFIES representation, which assumes 100% validity when converting to SMILES notation. Through the exploration of a hyper-spherical latent space, we demonstrated that a VAE trained on SELFIES representations can generate molecules that violate the assumption of validity, surpassing a set of null models in the same task. We propose the VAE and the associated anomaly generation methodology as an effective means of testing the robustness of molecular representations. Furthermore, we discuss potential sources of invalidity in the SELFIES representation (latest version 2.1.1) and suggest validating modifications to address these issues. This discussion aims to invite further discourse on SELFIES and molecular string representations, fostering continuous improvement and development in the field.

Palavras-chave: Variational Auto-Encoder. SELFIES. Anomaly generation.

Agência de fomento: CAPES (88887.357974/2019-00)

Referências:

1 LAPTEV, N. Anogen: deep anomaly generator. **Meta Research**. 2018. Disponível em: <https://research.facebook.com/file/969101687155819/AnoGen-Deep-Anomaly-Generator.pdf>. Acesso em: 2023.

- 2 GÓMEZ-BOMBARELLI, R. *et al.* Automatic chemical design using a data-driven continuous representation of molecules. **ACS Central Science**, v. 4, n.2, p. 268–276, Feb. 2018.
- 3 KRENN, M. *et al.* A self-referencing embedded strings (SELFIES): a 100% robust molecular string representation. **Machine Learning: Science and Technology**, v.1, n.4, p.045024-1-045024-8, 2020.

PG85

Biologia estrutural do carreador mitocondrial de piruvato humano (MPC), proteína-chave no metabolismo de glicose e na adaptação metabólica tumoral

DELPHITO, Leonardo¹; AMBROSIO, Andre Luis Berteli¹

leonardodelphito@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O metabolismo mitocondrial possui fundamental importância para diversas funções celulares, pois gera energia para a célula, por meio da oxidação de moléculas orgânicas, e precursores para a biossíntese de macromoléculas. Também contribui para a manutenção do equilíbrio redox e para o processamento de subprodutos metabólicos. Disfunções e alterações nessas vias estão relacionadas ao surgimento e progressão de várias doenças, inclusive cânceres. (1) Uma característica comum de células tumorais é a capacidade de reorganizar processos metabólicos. Essa habilidade é denominada adaptabilidade metabólica e é decorrente da capacidade da célula em processar substratos de várias maneiras, atendendo às suas necessidades energéticas e biossintéticas. Uma importante adaptação metabólica, frequentemente observada em várias linhagens tumorais, é o efeito Warburg, também conhecido como glicólise aeróbica. A observação desse efeito é muito utilizada para o diagnóstico de câncer. Glicose é um nutriente com papel central para o metabolismo mitocondrial e na adaptação metabólica tumoral, pois satisfaz duas necessidades básicas para a proliferação de células tumorais, a bioenergética e a biossíntese. De fato, as taxas de consumo de glicose por células tumorais são muito mais altas do que as de outros nutrientes. (2) Nesse contexto, esse projeto propõe o estudo de uma proteína-chave para o metabolismo mitocondrial da glicose, o carreador mitocondrial de piruvato humano (MPC). MPC1 e MPC2 são proteínas transmembrana responsáveis pelo transporte de piruvato através da membrana mitocondrial interna humana. Resultados experimentais sugerem que elas podem originar oligômeros de alta ordem. A formação de oligômeros de MPC está diretamente relacionada com a sua capacidade de transporte, decorrente da quantidade mínima necessária de hélices transmembrana para a formação e estabilização do poro transmembrana. (3) Então, utilizaremos crio-microscopia eletrônica (cryo-EM) de partícula única para estudos estruturais dos oligômeros do MPC, este inclusive, podendo estar encapsulado com lipídios da membrana. Ademais, também pretendemos utilizar a crio-tomografia eletrônica (cryo-ET) para estudar essas proteínas transmembrana in situ. Objetivamos obter um modelo estrutural de alta resolução que proporcione uma compreensão mais profunda sobre a organização oligomérica e o mecanismo funcional dessas proteínas. O projeto encontra-se nas etapas iniciais, foram realizadas a transformação e a expressão em *Saccharomyces cerevisiae*, esta que foi confirmada por microscopia de fluorescência confocal. Subsequentemente, serão realizadas a lise celular e a extração das proteínas da membrana por meio de encapsulamento por ácido estireno maleico (SMA), seguida da purificação por cromatografia de afinidade e de exclusão molecular. Então, o MPC encapsulado e purificado, seguirá para as etapas de crio-microscopia de partícula única.

Palavras-chave: Carreador mitocondrial de piruvato. Adaptação metabólica tumoral. Crio-microscopia eletrônica

Agência de fomento: CNPq (141082/2022-4)

Referências:

- 1 SPINELLI, J. B.; HAIGIS, M. C. The multifaceted contributions of mitochondria to cellular metabolism. **Nature Cell Biology**, v.20, n.7, p.745-754, July 2018.
- 2 HÖNIGOVA, K. *et al.* Metabolic tricks of cancer cells. **Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Reviews on Cancer**, v. 1877, n. 3, p. 188705-1-188705-18, May 2022.
- 3 QUESÑAY, J. E. N. *et al.* Insights on the Quest for the structure–function relationship of the mitochondrial pyruvate carrier. **Biology**, v, 9, n.11, p.407-1-407-17, Nov. 2020.

PG86

Influência da temperatura na internalização da curcumina em *Escherichia coli*

LIMA, Thalita Hellen Nunes¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; BLANCO, Kate Cristina¹

thalita.lima212@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A resistência antimicrobiana é um desafio urgente para a saúde global com impactos econômicos significativos. Estima-se que até 2050 alcançaremos a marca de 10 milhões mortes causadas por bactérias resistentes. (1) A espécie *Escherichia coli* (*E. coli*) tem se destacado pelo fato de ser um microrganismo que afeta as instalações de saúde e a comunidade em geral. As cepas de *E. coli* de terceira geração são especialmente prevalentes em infecções do trato urinário e na corrente sanguínea, destacando seu impacto na saúde pública. (2-3) A inativação fotodinâmica de bactérias (IFD) tem se apresentado como uma alternativa para este cenário e se baseia na ação de uma agente fotossensível que, sob excitação de luz em um comprimento de onda específico, produz espécies reativas capazes de inativar os microrganismos-alvo. Contudo, os processos de internalização dos fotossensibilizadores (FS), que são fundamentais para uma performance satisfatória da IFD, ainda não estão totalmente esclarecidos. Nesse sentido, esse trabalho teve como objetivo avaliar os efeitos térmicos e temporais no processo de internalização do FS curcumina em *E. coli* (ATCC 25922). Suspensões purificadas de *E. coli* foram expostas a soluções de curcumina, e, em sequência, separadas em grupos destinados a incubação em diferentes temperaturas. Para cada temperatura avaliada, ocorreu a exposição durante intervalos de tempo distintos. A estimativa de internalização de FS foi realizada por meio de absorção UV-visível, considerando a resposta espectral esperada da curcumina para as concentrações testadas. Os resultados sugeriram uma influência da temperatura e do tempo no processo de internalização do FS. Todavia, estudos adicionais são necessários para indicar a contribuição das variáveis independentes testadas e quantificar detalhadamente a internalização. Dessa forma, será possível direcionar os procedimentos a condições ideais de internalização deste FS no processo de IFD da *E. coli*, assim como elucidar um dos fatores essenciais envolvidos nos mecanismos de fotoinativação utilizando curcumina.

Palavras-chave: Fotossensibilizador. Terapia fotodinâmica antimicrobiana. Resistência antimicrobiana.

Agência de fomento: CAPES (8887.820460/2023-00)

Referências:

- 1 O'NEILL, J. **Tackling drug-resistant infections globally**: final report and recommendations. London: Wellcome Trust, 2016. 80 p. Review on Antimicrobial Resistance.
- 2 BONTEN, M. *et al.* Epidemiology of *Escherichia coli* bacteremia: a systematic literature review. **Clinical Infections Diseases**, v. 72, n. 7, p. 1211-1219, Apr. 2021.
- 3 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Global Antimicrobial Resistance and Use Surveillance**

System (GLASS) Report. 167 p. Geneva: WHO, 2021.

PG87

QCD em altas ordens no decaimento do Higgs em dois glúons

NOGUEIRA, Guilherme de Araújo¹; BOITO, Diogo Rodrigues¹

ga.nogueira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O conhecimento preciso do decaimento do bóson de Higgs em dois glúons é crucial para testar o setor do Higgs no modelo padrão. A amplitude de decaimento começa em um loop e é atualmente conhecida até a sexta ordem, ou *next-to-next-to-next-to-next-to-leading order* (N4LO). (1) No entanto, apesar desse resultado importante, a série perturbativa da QCD para esse processo não apresenta um bom comportamento ordem a ordem e retém uma incerteza de truncamento considerável associada a variações na escala de renormalização. Reduzir essa incerteza é de extrema importância para futuros testes de precisão da física do Higgs em aceleradores futuros, como o FCC-ee. Nesse contexto, utilizamos métodos para a estimativa de coeficientes desconhecidos da série com o objetivo de reduzir a incerteza de truncamento. Entre os métodos utilizados, destacam-se os aproximantes de Padé, que são aproximantes racionais amplamente empregados na literatura. Utilizamos, primeiramente, o método no espaço de Borel. Tal método no espaço de Borel (Padé-Borel) para o correlator de dois glúons no limite $\text{large-}\beta_0$, que serve como um laboratório para testar nosso método antes de aplicá-lo ao decaimento $H \rightarrow gg$, pois nesse limite conhecemos exatamente os coeficientes do correlator em todas as ordens em teoria de perturbação. (2) Além disso, investigamos os Aproximantes de Padé em conjunto com as técnicas de mudança de esquema de renormalização e mapeamento conforme. Após realizarmos nossas análises nesse contexto, constatamos o sucesso das estimativas realizadas ao compará-las com os coeficientes exatos do limite $\text{large-}\beta_0$. À luz dessas perspectivas, produzimos estimativas independentes de modelo para o coeficiente de $\mathcal{O}(\alpha_s^7)$ do decaimento $\Gamma(H \rightarrow gg)$ no esquema de renormalização $\overline{\text{MS}}$, além de investigar a dependência desse observável em relação ao número n_f de quarks não massivos. Para o caso fenomenológico de interesse, $n_f = 5$, o coeficiente estimado, acompanhado de um erro gaussiano, é $c_5 = -292 \pm 78$.

Palavras-chave: Decaimento do bóson de Higgs. Erro de truncamento. Aproximantes de Padé.

Agência de fomento: FAPESP (2022/01861-9)

Referências:

- 1 HERZOG, F. *et al.* On Higgs decays to hadrons and the R-ratio at N4LO. **Journal of High Energy Physics**, v. 2017, n. 8, p. 113-1 - 113-26, Aug. 2017.
- 2 JAMIN, M. The scalar gluonium correlator: $\text{large-}\beta_0$ and beyond. **Journal of High Energy Physics**, v. 2012, n. 4, p. 99-1 - 99-14, Apr. 2012.

PG88

Sobre a detectabilidade da Violação da invariância de Lorentz em chuveis atmosféricos extensos

SOUZA FILHO, Luiz Vitor de¹; MUNDO, Tales Leme¹

tales.mundo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

No final do século XIX, o surgimento do eletromagnetismo de Maxwell desafiou os fundamentos da física newtoniana, em particular a relatividade de Galileu. Para investigar esse impasse, Michelson e Morley conduziram o notório experimento, e seus resultados tiveram um impacto direto no desenvolvimento da teoria da Relatividade de Einstein. Atualmente, um dos grandes desafios na física é a busca por teorias que possam descrever de forma satisfatória a gravitação em nível quântico. Algumas dessas teorias sugerem a possibilidade de violação da invariância de Lorentz (LIV), uma simetria fundamental da Relatividade, em escalas de energia próximas à escala de Planck ($\sim 10^{28}$ eV). Essa potencial violação poderia ter efeitos observáveis em escalas de energia mais baixas, resultando em perturbações na cinemática e nas interações das partículas. (1) Neste trabalho, nosso objetivo é explorar a detecção e a restrição dos efeitos associados à possível violação da LI no contexto da propagação de partículas energéticas e suas interações com a atmosfera, com uma ênfase especial no setor hadrônico e na formação de píons. (2-3)

Palavras-chave: Raios cósmicos. Chuveis atmosféricos extensos. Quebra de Invariância de Lorentz.

Agência de fomento: FAPESP (2023/01285-0)

Referências:

- 1 MATTINGLY, D. Modern tests of Lorentz invariance. **Living Reviews in relativity**, v. 8, n. 1, p. 1-84, Dec. 2005.
- 2 KOSTELECKÝ, V. A.; LUNGHI, E.; VIEIRA, A. R. Lorentz violation and deep inelastic scattering. **Physics Letters B**, v. 769, p. 272-280, 2017.
- 3 GAGNON, O.; MOORE, G. D. Limits on Lorentz violation from the highest energy cosmic rays. **Physical Review D**, v. 70, n. 6, p. 065002, 2004.

PG89

A fotoxidação em bactérias persistentes

BLANCO, Kate Cristina¹; CORRÊA, Bruna Carolina¹

bruna.ccorrea@outlook.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A resistência antimicrobiana é um problema de saúde mundial que decorre do uso indiscriminado de antibióticos, resultando no surgimento e disseminação de patógenos resistentes. A persistência bacteriana é um fenômeno fenotípico no qual um subconjunto de bactérias sobrevive a doses letais de antibióticos, levando a infecções persistentes e dificuldades de tratamento. A inativação fotodinâmica (PDI) combina o uso de fotossensibilizadores e luz específica para gerar espécies reativas de oxigênio que podem inativar bactérias. Estudos têm mostrado que a combinação de PDI e antibióticos tem efeitos sinérgicos no tratamento de infecções. (1) O uso de PDI combinado com antibióticos é uma abordagem promissora para o tratamento de infecções persistentes. O presente estudo encontra-se nos estágios iniciais. Foi utilizada a bactéria *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923). A cepa é cultivada em meio Brain Heart Infusion (BHI) durante a noite a 37 ° C e 150 rpm. O inóculo é centrifugado, ressuspenso em solução salina tamponada com fosfato (PBS) e padronizado para 10⁷ a 10⁸ unidades formadoras de colônias por mililitro (CFU/mL). A partir do preparo do inóculo foi feita a curva de crescimento da bactéria. E para a curva de time-dependent killing a bactéria foi reativada e cultivada da mesma forma que foi citado anteriormente e após esses passos foi feito a diluição do inóculo bacteriano em uma concentração de 1:1000 e novamente esse inóculo foi incubado em uma incubadora shaker por 3h até atingir a fase estacionária, em seguida 1mL foi transferido para tubos eppendorfs e adicionado o antibiótico, voltando para incubação e depois 3h foi coletado as amostras para determinar o UFC/mL. (2)

Palavras-chave: Persistência. Antibiótico. Inativação fotodinâmica.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 NIMA, G. *et al.* Photodynamic inactivation of *Streptococcus mutans* by curcumin in combination with EDTA. **Dental Materials**, v. 37, n. 1, p. e1-e14, jan. 2021.
- 2 BALABAN, N. Q. *et al.* Definitions and guidelines for research on antibiotic persistence. **Nature Reviews Microbiology**, v. 17, n. 7, p. 441-448, abr. 2019.

PG90

Mecanismos básicos da propagação do ultrassom com tecidos biológicos para aplicação na Terapia Sonodinâmica (TSD)

APARECIDA, Camila Aparecida¹; PRATAVIEIRA, Sebastião¹

camila.antunes@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As ondas ultrassônicas podem ser utilizadas para diversas terapias e diagnóstico de doenças humanas. Dentre as vantagens da utilização de terapias com ultrassom (US), pode-se citar a fácil penetração do mesmo no tecido biológico e sua não absorção por tumores pigmentados, o que pode torná-lo eficaz no combate à células do tipo melanoma. (1) Dentre as terapias que se utilizam do US, tem-se a Terapia Sonodinâmica (TSD), baseada na interação do US com um fármaco que pode resultar na produção de espécies reativas de oxigênio (ERO). Tal terapia consiste em um procedimento não invasivo que pode ser utilizado no combate de células cancerígenas, pois uma alta concentração de ERO provoca a morte celular. A propagação do US no tecido pode desencadear uma série de efeitos capazes de causar danos às células, como a nucleação e cavitação acústicas, ou seja, a formação e oscilação de bolhas de gás e vapor no meio. (2) Isso faz com que uma boa compreensão da propagação no US em meios biológicos seja fundamental para sua aplicação na TSD. Tendo isso em vista, o objetivo do presente projeto consiste em entender e propor modelos capazes de descrever a propagação de ondas ultrassônicas nos tecidos biológicos alvos da TSD, em especial a pele, visando o tratamento de neoplasias nessa região a partir de tal técnica. Para isso, inicialmente vem sendo feito um levantamento bibliográfico dos modelos teóricos utilizados na descrição da propagação do US em diferentes tecidos biológicos, a fim de se entender a importância dos fenômenos de absorção (atenuação), refração, reflexão (eco) e difração da onda acústica. Também buscamos considerar por completo as características do transdutor plano utilizado como gerador do US para terapias de baixa intensidade, como o Beam Nonuniformity Ratio (BNR), as regiões de Fraunhofer e Fresnel, a fim de que seja possível obter um modelo computacional que descreva localmente a intensidade e variação de pressão acústica no meio biológico, seguindo os valores comumente utilizados na TSD (frequência = 1 MHz e intensidade = 1,5 W/cm², por exemplo). Além disso, as análises também serão realizadas considerando-se propriedades da pele saudável e contendo tumor do tipo melanoma disponíveis na literatura, uma vez que tecido tumorais podem interagir com o US de maneira diferente devido às suas propriedades físicas distintas, como elasticidade e tensão superficial. A solução e modelamento dos casos descritos será realizada nos softwares Wolfram Mathematica e MATLAB. A análise realizada até o momento tem mostrado que existem diversos trabalhos que descrevem a propagação do US no tecido biológico, especialmente na área da ultrassonografia. No entanto, para que seja possível descrever como ocorre tal fenômeno visando sua aplicação na TSD, faz-se necessário adaptar e resolver os modelos propostos considerando, por exemplo, as características do transdutor e os valores dos parâmetros ultrassônicos utilizados neste tipo de terapia, a fim de que seja possível descrever com maior precisão o comportamento das ondas sonoras no tecido humano, para a elaboração um protocolo seguro para a TSD no tratamento do câncer.

Palavras-chave: Propagação do ultrassom no tecido biológico. Modelamento computacional. Terapia

Sonodinâmica.

Agência de fomento: CAPES (88887.803873/2023-00)

Referências:

- 1 NENE, L. C. *et al.* Effect of ultrasonic frequency and power on the sonodynamic therapy activity of cationic Zn (II) phthalocyanines. **Journal of Inorganic Biochemistry**, v. 217, p. 111397-1-111397-12, 2021.
- 2 VLAISAVLJEVICH, E. *et al.* Effects of ultrasound frequency and tissue stiffness on the histotripsy intrinsic threshold for cavitation. **Ultrasound in medicine & biology**, v. 41, n. 6, p. 1651-1667, 2015.

PG91

Ação fungicida de tubos endotraqueais funcionalizados com curcumina

BLANCO, Kate Cristina¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; SANTOS, Gabriel Grube dos¹

gabrielgrube@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Todos os anos, em unidades de tratamento intensivo é realizado o procedimento de entubação endotraqueal, uma intervenção emergencial e invasiva ao paciente. Quando associada a necessidade de uso prolongado, uma das complicações relacionada a esta técnica é a pneumonia associada a ventilação mecânica (Ventilator-associated pneumonia - VAP) originada por uma infecção no trato respiratório, causada pela formação de biofilmes na superfície do tubo endotraqueal (TET) e a ventilação de espécies bacterianas e fungicas aos pulmões, pela debilitação natural do sistema imunológico do paciente as VAP's estão ligadas a altas taxas de mortalidade. (1) Trabalhos anteriores mostram a eficiência do processo em espécies bacterianas, como complemento este trabalho busca estudar o comportamento de biofilmes na superfície de um TET funcionalizado com curcumina com a finalidade de reduzir a formação de biofilmes da sepa fungica de *Candida Albicans*. (2) A metodologia deste trabalho é a infecção controlada por *C. albicans* (10^8 CFU/mL) em pedaços de 1cm de tubos funcionalizados com diferentes concentrações de curcumina e posteriormente aplicação de terapia fotodinâmica antimicrobiana (aPDT) com diferentes dosagens de radiação. Utilizando a técnica de contagem de colônias obtemos uma estimativa da taxa de sobrevivência dos micro-organismos após a aplicação da aPDT. O tempo de formação do biofilme foi de 48h após a infecção inicial, dado que este é tempo mínimo conhecido para o desenvolvimento de VAP. Foram testados três diferentes concentrações de curcumina no processo de funcionalização sendo elas: 1/2, 1/3 e 1/5. (2) As doses de luz para avaliação da eficiência dos diferentes TET utilizadas foram 50J, 100J e 150J com uma fonte de irradiância de 140mW/cm^2 e comprimento de onda de 445nm aplicadas por fibra óptica pelo interior do tubo. Os resultados obtidos indicam que todas as concentrações causam algum desequilíbrio na formação do biofilme, porem as concentrações de 1/5 e 1/2 não são significativas para aPDT (menor que 1 log de redução), já a concentração de 1/3 é a que tem redução mais significativa em comparação ao grupo controle quando avaliada a taxa de sobrevivência dos diferentes grupos com redução de até 1,77 logs de CFU/mL e taxa de morte de 98,3% em relação ao grupo controle, logo após, os valores das dosagens de luz foram especificados para 15J, 30J, 45J e 60J para o grupo 1/3 para otimização dos resultados. Dessa forma, o presente trabalho demonstra a eficiência do TET funcionalizado na concentração de 1/3 em comparação aos demais.

Palavras-chave: aPDT. Fungos. Descontaminação.

Agência de fomento: CAPES (88887.803779/2023-00)

Referências:

1 MEAWED, T. E. *et al.* Bacterial and fungal ventilator associated pneumonia in critically ill COVID-19

patients during the second wave. **Journal of Infection and Public Health**, v. 14, n. 10, p. 1375-1380, 2021. DOI: 10.1016/j.jiph.2021.08.003.

2 ZANGIROLAMI, A. C. *et al.* Avoiding ventilator-associated pneumonia: curcumin-functionalized endotracheal tube and photodynamic action. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 117, n. 37, p. 22967-22973, 2020. DOI: 10.1073/pnas.2006759117.

PG92

Desenvolvimento e validação de um método analítico para quantificação da cisplatina a partir de nanocarreadores biomiméticos

CARDOSO, Valéria Maria de Oliveira¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹; BISTAFFA, Maria Julia¹

mjbistaffa@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A nanotecnologia tem proporcionado um efeito terapêutico melhor com a entrega mediada por nanopartículas, reduzindo a toxicidade de diferentes quimioterápicos. (1) A cisplatina é um quimioterápico amplamente utilizado, que apresenta elevada toxicidade dependente da dose. (2) Neste estudo, foi desenvolvido e validado um método analítico para quantificação da cisplatina encapsulada em nanopartículas à base de ácido poli(lático-co-glicólico; PLGA), revestidas com membranas híbridas, derivadas de células linfoblásticas e células tumorais de pulmão (A549; NP@m), para o tratamento do câncer de pulmão. O método foi desenvolvido e validado utilizando espectroscopia UV-Vís após derivatização a cisplatina com o-fenilenediamina (complexo OPDA; CIS) a 705 nm, seguindo as diretrizes da Conferência Internacional sobre Harmonização (ICH). As nanopartículas foram sintetizadas pelo método de nanoprecipitação e caracterizadas por espalhamento de luz dinâmico (DLS), análise de rastreamento de nanopartículas (NTA). A morfologia das nanopartículas foi avaliada pela microscopia eletrônica de varredura (MEV) e a eficiência de encapsulação foi obtida pelo método indireto. Os resultados mostraram que o método de quantificação foi seletivo, preciso (98,8%), reprodutível e o limite de quantificação foi de 0,28 µg/mL de CIS. As nanopartículas exibiram uma forma esférica bem definida, com um diâmetro médio de aproximadamente 142 ± 6 nm e PDI de 0,106, indicando a homogeneidade de distribuição das amostras. O potencial zeta negativo foi de -6 ± 1 mV, característico do polímero, e a eficiência de encapsulação de 43%, demonstrando a capacidade das nanopartículas em reter e encapsular a cisplatina com eficácia. O método de quantificação demonstrou sua alta sensibilidade na quantificação de CIS* e o nanocarreador desenvolvido mostrou-se uma nanoplataforma altamente promissora para o carregamento eficiente da cisplatina.

Palavras-chave: Cisplatina. Método analítico. Nanocarreador.

Agência de fomento: FAPESP (2022/01434-3)

Referências:

1 JANCZURA, M. *et al.* The development of innovative dosage forms of the fixed-dose combination of active pharmaceutical ingredients. **Pharmaceutics**, v. 14, p. 1-22, 2022. DOI: 10.3390/pharmaceutics14040834.

2 SHAIK, A. N. *et al.* Development and validation of a LC–MS/MS assay for quantification of cisplatin in rat plasma and urine. **Journal of Chromatography B**, v. 1046, p. 243-249, 2017. DOI:

10.1016/j.jchromb.2016.11.027.

PG93

Nanocarreadores multifuncionais para aplicação em câncer de pulmão

BERNARDI, Juliana Cancino¹; GALVANI, Pietra de Barros²; ZUCOLOTTO, Valtencir²

pietragalvani@outlook.com

¹Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP; ²Instituto de Física de São Carlos – USP

O câncer é uma das doenças com maior mortalidade e, consequentemente, de maior impacto na economia mundial, de acordo com a Organização Mundial de Saúde. O câncer de pulmão é o responsável pelo maior número de casos, devido principalmente ao diagnóstico tardio. Além disso o uso do fármaco padrão doxorrubicina (DOX) tem apresentado resistência medicamentosa e certa toxicidade, principalmente ao sistema cardiovascular, quando usada livre. (1) Estudos que possibilitem novas tecnologias para diagnóstico e tratamento de câncer são de extrema importância. A nanomedicina avança cada vez mais, principalmente na área de teranósticos para detecção e tratamento de doenças. Para conferir especificidade ao sistema, o recobrimento de nanopartículas com membrana natural de células é uma estratégia inovadora, oferecendo superfícies seletivas e a possibilidade de diminuir efeitos adversos da doxorrubicina. (2) Aliada aos avanços de camuflagem de nanopartículas está a terapia fototérmica com nanorods de ouro (AuNRs) que pode gerar um rápido aquecimento localizado a partir do efeito de ressonância plasmônica de superfície da nanopartícula. (3) Esse estudo teve como objetivo o desenvolvimento de sistemas teranósticos com membrana celular (CM) da célula humana de câncer de pulmão A549, para recobrimento de nanorods de ouro e doxorrubicina, em conjunto com a terapia fototérmica. As células A549 foram cultivadas, e sua membrana celular extraída. As caracterizações demonstraram um tamanho de 346 nm, índice de polidispersão (Pdl) 0.665 e potencial zeta igual a -30mV, e a extração foi quantificada pela concentração de proteínas obtida por ensaio de BCA. As nanopartículas sintetizadas por métodos de extrusão apresentaram um tamanho de 220 nm e potencial zeta -9mV. As nanopartículas sintetizadas em banho ultrassom apresentaram potencial zeta -21mV. Serão realizadas caracterizações adicionais e análises de microscopia para verificar se os componentes foram encapsulados pela membrana, para que então o sistema completo com membrana celular, AuNR e DOX seja desenvolvido e testado *in vitro* em células saudáveis e em células de câncer de pulmão.

Palavras-chave: Teranóstico. Terapia fototérmica. Membrana celular.

Agência de fomento: CNPq (382672/2022-4)

Referências:

1 ZHANG, Y. *et al.* Co-delivery of doxorubicin and curcumin via cRGD-peptide modified PEG-PLA self-assembly nanomicelles for lung cancer therapy. **Chinese Chemical Letters**, v. 33, n. 5, p. 2507-2511, 2022.

2 PATEL, P. D. *et al.* Drug loaded erythrocytes: as novel drug delivery system. **Current Pharmaceutical Design**, v. 14, n. 1, p. 63-70, 2008.

3 MARANGONI, V. S.; CANCINO-BERNARDI, J.; ZUCOLOTTI, V. Synthesis, physico-chemical properties, and biomedical applications of gold nanorods-A review. **Journal of Biomedical Nanotechnology**, v. 12, n. 6, p. 1136-1158, 2016.

PG94

Radiative model reconstruction of the Galactic Center central gamma-ray source

VIANA, Aion da Escóssia Melo¹; MOMESSO, Daniel Cecchin¹

daniel.cecchin@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Among all the high-energy environments of our Galaxy, the Galactic Center region is definitely the richest with HESS J1745-290 being its brightest source of γ -rays. (1) However, its origin is still unknown, and it may be related to accretion in the central black hole (Sgr A), a wind from prolonged pulsars, or another type of source. *This work aims to investigate whether the central source of γ -rays would be linked to cosmic particle accelerators, discovered in this region, capable of accelerating particles to PeV energies, called Pevatron. In this scenario, the stochastic acceleration of protons (up to PeV energies) interacting with the turbulent magnetic field in the vicinity of Sgr A could produce an escape flow of relativistic protons that diffuse outwards interacting with the molecular clouds that surround this region producing the observed γ -ray.* (2) To explore this hypothesis, the morphology of the molecular clouds inside the central 10pc Sgr A* were modeled, as well as the production of γ -rays from the decay of π^0 that are produced through the proton-proton interaction of cosmic rays, which in the diffusion process collide with these clouds. With the elaboration of a computational code, the flux of γ -rays was calculated in two different scenarios, from a source of impulsive and continuous injection cosmic rays, and in each case a 2D image of these flows was made, obtaining different morphologies for each scenario. In the next, we will simulate the observed morphology of these two scenarios by convolving them a γ -ray telescope , such as CTA, instrument response function. We hope to be possible to infer if CTA will be able to differentiate which of the γ -ray emissivity scenarios is occurring in this region.

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

Agência de fomento: FAPESP (2022/04510-2)

Referências:

- 1 LONGAIR, M. S. **High energy astrophysics**. 3. ed. New York: Cambridge University Press, 2011.
- 2 FERRIÈRE, K. Interstellar gas within 10 pc of Sagittarius A*. **Astronomy and Astrophysics**, v. 540, p. A50-1-A50-21, Apr. 2012. DOI: 10.1051/0004-6361/201117181.

PG95

Funções de Green e confinamento de cor

CUCCHIERI, Attilio¹; GARCIA, Gustavo Henrique Marques¹

gustavo-marques1@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O comportamento infravermelho de propagadores e de vértices é de fundamental importância para o entendimento do limite de baixas energias da Cromodinâmica Quântica (QCD), especialmente no que diz respeito ao problema do confinamento de quarks e de glúons. O objetivo deste projeto é tentar conciliar os argumentos geométricos do cenário de confinamento de Gribov-Zwanziger (1) [que prevê —no gauge de Landau e no caso de espaço-tempo de dimensão três e quatro— um comportamento infravermelho das funções de Green de acordo com a chamada solução conforme das equações de Dyson-Schwinger (EDS)] (2) com os resultados obtidos usando simulações numéricas de QCD na rede, que favorecem a chamada solução massiva das EDS.

Palavras-chave: Cenário de Gribov-Zwanziger. Confinamento de cor. Funções de Green.

Agência de fomento: CAPES (8887821540/2023-00)

Referências:

- 1 PASECHNIK, R.; ŠUMBERA, M. Different faces of confinement. **Universe**, v. 7, n. 9, p. 1-55, Sept. 2021. DOI: 10.3390/universe7090330.
- 2 VANDERSICKEL, N.; ZWANZIGER, D. The Gribov problem and QCD dynamics. **Physics Reports**, v. 520, n. 4, p. 175-251, Nov. 2012. DOI: 10.1016/j.physrep.2012.07.003.

PG96

Quantum Complexity and efficient synthesis of quantum evolution in the presence of noise

SILVA, Adonai Hilario da¹; MORAZOTTI, Nicolás André¹; NAPOLITANO, Reginaldo¹

nicolas.morazotti@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The presence of an environment perturbing a quantum system introduces errors that can hinder information storage and processing in quantum computers. Minimizing these errors requires efficient synthesis of the desired evolution. A key concept in achieving this goal is quantum complexity, which measures the difficulty of synthesizing a specific evolution. (1) Traditionally, quantum complexity is quantified by the number of gates from a universal gate set needed to generate a desired unitary transformation. In our approach, we used the redefined complexity: it is the length of the geodesic connecting the system identity to the desired unitary evolution. (2) Previous studies have explored the use of recurrent neural network architectures for predicting control sequences to synthesize desired unitaries. (3) Our research builds upon these references by introducing noise to the steered Hamiltonian. We model noise as a non-controllable drift Hamiltonian and purify the system by adding one ancillary qubit for the qubit of interest. The drift Hamiltonian is modeled by a dephasing noise, based on the Caldeira-Leggett theory of Brownian motion. By using artificial neural networks that predict good costates of the desired evolution, and using usual minimization tools on the predicted costates, we are able to obtain infidelities of 10^{-8} between predicted and target unitaries. Furthermore, we investigate the impact of noise on complexity. Specifically, we explore how the inclusion of noise affects the number of gates required for synthesis. By advancing the understanding of efficient synthesis techniques and accounting for noise effects, our research contributes to improving the reliability and performance of quantum computing systems.

Palavras-chave: Computação quântica. Teoria de controle. Aprendizado de máquina.

Agência de fomento: CAPES (88887.339588/2019-00)

Referências:

- 1 NIELSEN, M. A. *et al.* Quantum Computation as Geometry. **Science**, v. 311, n.5764, p.1133-1135, Feb. 2006.
- 2 BROWN, A. R.; SUSSKING, L. Complexity geometry of a single qubit. **Physical Review D**, v.100, p.046020-1-046020-20, Aug. 2019.
- 3 PERRIER, E.; TAO, D.; FERRIE, C. Quantum geometric machine learning for quantum circuits and control. **New Journal of Physics**, v.22, n.10, p.103056-1-103056-36, Oct. 2020.

PG97

Identificação e caracterização do *black carbon*.dissolvido: sua associação com matéria orgânica dissolvida e sua toxicidade em zooplanctons

PRATAVIEIRA, Sebastião¹; VICENTE, Maria Luiza Ferreira¹; VERAS, Mariana Matera²; TOVAR, Johan Sebastián Díaz¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹; SALDIVA, Paulo Hilário Nascimento²; MOUNIER, Stéphane³; HAJJOUL, Houssam³

maria.luiza.vicente@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP; ²Faculdade de Medicina - USP; ³University of Toulon - UNIV-TLN

Nos últimos anos temos colaborado efetivamente com os pesquisadores Prof. Paulo Hilário Nascimento Saldiva e Dra. Mariana Matera Veras do Laboratório Experimental de Poluição do Ar no estudo da localização do material particulado proveniente da poluição atmosférica da cidade de São Paulo no corpo humano. As subunidades de fuligem, nanopartículas de *black carbon*.(BC), advindas principalmente da queima incompleta de combustíveis fósseis podem prejudicar a saúde humana e do meio ambiente, já que possuem tamanhos nanométricos e propriedades aerossóis. (1) É possível identificá-las em diferentes tecidos humanos por meio de microscopia de fluorescência confocal multifônica. Estudamos sua morfologia e forma de agregação molecular através da caracterização óptica. A estrutura espacial dos estados agregados nas nanopartículas é responsável por todos os seus processos foto físicos (conversão ascendente do fóton, emissão de fluorescência na região do vermelho, absorção em todos os comprimentos de onda do visível e infravermelho próximo) e fotoquímicos (geração de oxigênio singleto). Todas essas características permitem sua identificação inequívoca nos tecidos humanos e em amostras ambientais. Durante o mestrado identificamos as partículas de BC em tecidos humanos de forma qualitativa através do apontamento dos pontos "vermelhos" nas imagens espectrais colocadas com os pontos "pretos" nas imagens de transmissão óptica, status definido pela caracterização óptica extensa através da microscopia confocal por excitação multifotônica realizada também durante o período do mestrado. Neste projeto de doutorado será incorporada a identificação das partículas de BC em amostras ambientais marítimas recolhidas da Baía de Toulon na França após a caracterização óptica por excitação multifotônica da associação de matéria orgânica (MO), como ácidos húmicos e fúlvicos, e partículas de BC. (2) Também será investigado os efeitos toxicológicos destas partículas em zooplanctons, microrganismos base da cadeia alimentar, através da quantificação da geração de oxigênio singleto em condições miméticas as zonas eufóticas. Inicialmente, para automatizar a identificação destas partículas nas imagens multifônicas foi criado uma rotina de identificação das partículas em imagens de tecido utilizando software MATLABR2021b. A rotina colocaliza a intensidade de emissão em imagens, após a passagem destas para escala de cinzas, de 4 canais distintos (Ch 1 – 400nm – 410nm; Ch2 – 450nm-590nm; Ch3 – 600nm-690nm; máxima intensidade), (Ch4 – luz transmitida; mínima intensidade), após a excitação por dois fótons em 810nm. (3) Os parâmetros de intensidade para cada canal foram correlacionados com os dados obtidos nas caracterizações ópticas anteriores. Foram realizados testes com 2 imagens de bulbo olfatório, a primeira de camundongo, exemplares que inalaram as partículas de BC por 6 meses e bulbo olfatório humano (amostras cedidas pela Faculdade de Medicina da Universidade de São Paulo do

Laboratório Experimental de Poluição do Ar). A rotina foi capaz de identificar as partículas de BC em ambos os tecidos e quantificá-las da maneira correta, sendo mais eficaz que as análises qualitativas. A rotina será testada para amostras contendo partículas de BC associadas a MO e diferentes comprimentos de onda de excitação por dois fótons. Espera-se que ela seja capaz de auxiliar na identificação das partículas de BC ao longo deste trabalho de doutorado.

Palavras-chave: *Black carbon*. Matéria orgânica. Multifotônica.

Agência de fomento: CAPES (8887.821582/2023-00)

Referências:

- 1 MICHELSEN, H. A. *et al.*. A review of terminology used to describe soot formation and evolution under combustion and pyrolytic conditions. **ACS Nano**, v. 14, n. 12, p. 12470-12490, 2020.
- 2 MANNINO, A.; HARVEY, H. R. Black carbon in estuarine and coastal ocean dissolved organic matter. **Limnology and Oceanography**, v. 49, n. 3, p. 735-740, 2004.
- 3 RASKING, L. *et al.*. Ambient black carbon reaches the kidneys. **Environment International**, v. 177, p. 107997-1 - 107997-9, 2023.

PG98

Construção de simulacros quânticos

MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹; SILVA, Luís Felipe Alves da¹

silvaluis@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Nos últimos 25 anos, o uso de métricas não-convencionais em sistemas quânticos tem se tornado fundamental para abordar uma classe de hamiltonianos não-hermitianos que exibem simetrias antilineares, especialmente os hamiltoniano PT simétricos. (1-2) Uma característica surpreendente desses hamiltonianos não-hermitianos é a existência de autovalores reais. Esses sistemas, quando analisados em uma métrica específica, têm revelado efeitos físicos que não se manifestam em sistemas hermitianos convencionais. (3) Normalmente, adotamos a métrica usual (operador identidade) para sistemas hermitianos e métricas não-convencionais para sistemas não-hermitianos que apresentam simetrias antilineares. Neste trabalho, exploramos o uso de métricas não-convencionais em sistemas hermitianos para demonstrar a possibilidade de criar interações entre um átomo de 2 níveis e um modo do campo eletromagnético, mesmo quando não há uma interação física real entre eles. Essas interações se manifestam nas medidas dos observáveis do sistema. A possibilidade da construção desse simulacro desafia nossa compreensão da natureza das medidas e da realidade. Além disso, a implementação dos simulacros quânticos pode ter implicações tecnológicas de grande relevância, permitindo a superação de efeitos indesejáveis em sistemas quânticos, como a decoerência e a dissipação.

Palavras-chave: Simulacro de interações. Medidas quânticas. Interação radiação-matéria.

Agência de fomento: CAPES (88887.684394/2022-00)

Referências:

- 1 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having PT symmetry. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 24, p. 5243-5246, 1998.
- 2 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-hermiticity versus PT symmetry: the necessary condition for the reality of the spectrum of a non-hermitian hamiltonian. **Journal of Mathematical Physics**, v. 43, n. 1, p. 205-214, 2002.
- 3 PONTE, M. A. *et al.* All-creation and all-annihilation time-dependent PT -symmetric bosonic Hamiltonians: an infinite squeezing degree at a finite time. **Physical Review A**, v. 100, p. 012128-1 – 012128-11, 2019.

PG99

Efeitos do strain em nanofios politípicos

SIQUEIRA, Anderson Henrique¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

anderson.siqueira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Nanofios semicondutores de compostos III-V apresentam grande variedade de aplicações em dispositivos tecnológicos. O avanço das técnicas de crescimento dessas nanoestruturas, permite obter nanofios na fase zincblend ou wurtzita puros, como também é possível produzir nanofios onde essas duas fases coexistem. Essa coexistência dessas duas fases é denominada de politipismo, e tem grandes efeitos sobre as estruturas de bandas, devido ao confinamento dos portadores de carga. O politipismo das fases zincblend e wurtzita em nanofios de compostos III-V, está relacionado a parâmetros como o diâmetro do nanofio e a temperatura de crescimento dessa nanoestrutura. (1) A descrição realista das estruturas de bandas permite entender a influência do confinamento sobre os portadores de carga, e como isso afeta as propriedades ópticas e eletrônicas do sistema. Neste trabalho, o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ será usado para construir o Hamiltoniano 8×8 para as estruturas cristalinas zincblend e wurtzita. Partindo da formulação das funções envelope, construiremos o Hamiltoniano matricial para uma heteroestrutura no espaço direto, e expandindo as funções envelope em ondas planas, construiremos o Hamiltoniano para uma heteroestrutura no espaço recíproco. O politipismo acarreta em constantes de redes diferentes para as duas fases cristalinas, que tendem a se ajustar na interface politípica. (2) O principal objetivo deste trabalho é construir um modelo matemático que descreva como os parâmetros de rede das fases zincblend e wurtzita se ajustam na interface politípica. O *strain*, que resulta dessa interação dos átomos da fase zincblend e wurtzita na interface politípica, será aplicado em um poço quântico para investigar quais seus efeitos sobre as estruturas de bandas de um sistema politípico wurtzita/zincblend.

Palavras-chave: Nanofios. Politipismo. Strain.

Agência de fomento: CAPES (88887.803624/2023-00)

Referências:

- 1 DICK, K. A. *et al.*. Control of iii-v nanowire crystal structure by growth parameter tuning. **Semiconductor Science and Technology**, v. 25, n. 2, p. 024009-1 - 024009-11, 2010.
- 2 ERTEKIN, E. *et al.*. Equilibrium limits of coherency in strained nanowire heterostructures. **Journal of Applied Physics**, v. 97, n. 11, p. 114325-1 - 114325-10, 2005.

PG100

Superradiância e superabsorção em amostras atômicas densas

MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹; ARAÚJO, Ítalo Moreira de¹

italo.maraujo@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A superradiância em amostras atômicas moderadamente densas foi predita em 1954 por R. Dicke (1), e consiste no processo de emissão espontânea coletiva da amostra. Este processo de emissão coerente de um pulso de luz dá-se em função da interação indireta dos átomos com os fótons emitidos, o que ocorre num intervalo de tempo igual a $2\gamma/N$, sendo γ^{-1} o tempo de decaimento por emissão espontânea de um átomo. A intensidade deste pulso é proporcional a N^2 , em contraste com a intensidade do processo incoerente de fluorescência, proporcional a N . Em 2014, Higgins e colaboradores (2) propuseram o processo de superabsorção da luz por uma amostra atômica, a recíproca do processo de superradiância, e mais recentemente, em 2021 (3), propusemos a construção das oscilações coerentes de Rabi quando da interação de uma amostra atômica com um modo da cavidade, através da combinação dos processos de superradiância e superabsorção. O período dessas oscilações coerentes de Rabi, \sqrt{N} vezes menor que aquele da interação de um único átomo com o modo da cavidade, encontra aplicação na implementação do processamento de informação quântica, contribuindo para o campo da computação e comunicação quânticas. No presente projeto pretendemos estudar os processos de superradiância e superabsorção em amostras densas, nas quais consideramos a interação dipolo-dipolo entre os átomos, ao invés dos átomos não interagentes das amostras moderadamente densas. Logo, além da interação dos átomos com o meio ambiente, devemos agora considerar as interações dos átomos entre si, o que demanda técnicas adequadas para a derivação da equação mestra que descreve o sistema. A partir desse estudo, devemos prosseguir com o acoplamento de uma amostra densa com um modo da cavidade, analisando as potencialidades da utilização de amostras atômicas densas no campo da eletrodinâmica quântica de cavidades e no campo da informação quântica. Como perspectivas futuras, devemos analisar os processos de superradiância e superabsorção considerando um par de amostras atômicas interagente. É possível que a superradiância de uma amostra induza o processo análogo em outra amostra? Em caso afirmativo, a primeira amostra estaria induzindo uma transição de fase de segunda ordem na segunda amostra, análoga à transição de fase do ferromagnetismo, em que a magnetização é substituída pela polarização atômica. O campo dos processos coletivos em óptica quântica encontra-se em seus primórdios, e nele há muito ainda a se fazer, em particular no âmbito da eletrodinâmica quântica de cavidades quando amostras atômicas interagem com modos do campo de radiação.

Palavras-chave: Superradiância. Superabsorção. Amostras densas.

Agência de fomento: CAPES (88887.682835/2022-00)

Referências:

1 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review**, v. 93, n. 1, p.

99-110, 1954.

2 HIGGINS, K. D. B. *et al.* Superabsorption of light via quantum engineering. **Nature Communications**, v. 5, p. 4705-1-4705-7, 2014.

3 DOURADO, R. A.; MOUSSA, M. H. Y. Coherent many-body Rabi oscillations via superradiance and superabsorption and the mean-field approach for a superradiant laser. **Physical Review A**, v. 104, n. 2, p. 023708-1-023708-6, 2021.

PG101

Sistemas estáticos, estacionários e dependentes do tempo no Anti-de-Sitter e sua interpretação holográfica

HARTMANN, Betti¹; RAMPONI, Tereza Cristina¹

teka_ramponi@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As modificações da Relatividade Geral são geralmente motivadas assumindo que a Relatividade Geral é apenas um limite clássico de baixa energia de uma teoria quântica da gravidade. Um dos melhores candidatos para tal teoria continua sendo a teoria das Cordas. Uma previsão notável da Teoria das Cordas é a chamada dualidade calibre/gravidade, uma conjectura que relaciona as teorias da gravidade em $(d + 1)$ dimensões espaço-temporais às teorias de calibre em d dimensões. O exemplo mais bem testado e bem estudado é a correspondência Anti-de Sitter / Teoria de Campo Conforme (AdS / CFT) (1), que conecta uma teoria da gravidade no espaço-tempo AdS em $(d + 1)$ dimensões a uma teoria de calibre na fronteira de AdS. Essas ideias foram aplicadas principalmente à descrição de supercondutividade de alta temperatura na estrutura de supercondutores holográficos (2) também como a descrição do plasma quark-gluon. Em alguns desses modelos, foi demonstrado que os buracos negros formam cabelos escalares ou vetoriais espontaneamente. (3) O objetivo deste projeto é compreender o caso da vetorização espontânea em AdS.

Palavras-chave: Relatividade geral. Teoria de campo conforme. AdS/CFT.

Agência de fomento: CNPq (140078/2023-1)

Referências:

- 1 MALDACENA, J. The large N limit of superconformal field theories and supergravity. **Advances in Theoretical and Mathematical Physics**, v. 2, n. 2, p. 231-252, 1998.
- 2 HARTNOLL, S. A.; HERZOG, C. P.; HOROWITZ, G. T. Holographic superconductors. **Journal of High Energy Physics**, v. 2008, n. 12, p. 015-1-015-41, Dec. 2008.
- 3 BRIHAYE, Y.; HARTMANN, B. Spontaneous scalarization of charged black holes at the approach to extremality. **Physical Letters B**, v. 792, p. 244-250, May, 2019.

PG102

Resposta vascular da combinação de fotobiomodulação e radioterapia em carcinoma epidermóide

SOUZA, Giancarlo de¹; PATIÑO, Claudia Patricia Barrera¹; FARIA, Clara Maria Gonçalves de¹; COSTA, Camilla dos Santos¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

camilla.santos.costa@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

O trabalho investiga os efeitos da combinação de Radioterapia (RT) e Terapia por Fotobiomodulação (PBMT) na vascularização tumoral. Um dos fatores que determinam o sucesso da RT é a oxigenação tecidual, uma vez que tecidos hipóxicos, ou seja, pouco oxigenados, são mais radorresistentes. A PBMT utiliza a luz para modular a atividade celular, reduzindo a inflamação e aumentando a vascularização tecidual. Estudos anteriores mostraram que a PBMT tem o potencial de contribuir para a radiosensibilização do tumor. (1-2) Foram realizados experimentos *in vitro* com a linhagem endotelial humana EA.hy926 para investigar as possíveis alterações vasculares causadas pelo protocolo combinado PBMT (5J/cm², 780nm) - RT (2,5Gy) e com a linhagem de carcinoma epidermóide humano A431 para avaliar os efeitos de morte proliferativa causada pelo protocolo proposto. Os resultados de MTT-múltiplo (proliferação) revelaram que as células endoteliais submetidas a RT e a PBMT-RT apresentaram uma restauração parcial de sua taxa de proliferação. O mesmo não foi observado para as células de carcinoma, uma vez que sua proliferação diminuiu ao longo do tempo. Consequentemente, as células endoteliais apresentaram maior resistência à radiação, o que pode ser vantajoso para o protocolo PBMT-RT ao preservar a vascularização do tumor durante a terapia e contribuir para a perfusão, mantendo assim a oxigenação tecidual. O ensaio de incorporação de BrdU, uma análise de proliferação por imunofluorescência, e por isso, mais sensível que o anterior, indicou que aproximadamente 7% das células endoteliais entraram na fase S do ciclo celular, enquanto para a A431 esse valor foi cerca de 30%, sem diferença entre os grupos PBMT-RT e RT para nenhuma linhagem. Com esses experimentos *in vitro* concluiu-se que o potencial radiosensibilizante da PBMT provavelmente não ocorre por vias de alteração na proliferação de células endoteliais. Experimentos *in vivo* com xenoinxertos de carcinoma em camundongos balb/c NUDE mostraram que o grupo PBMT não apresentou diferenças estatisticamente significativas em comparação com o grupo controle durante todo o período de observação e o grupo combinado PBMT-RT não diferiu significativamente do grupo RT, indicando que a combinação PBMT-RT tem o potencial de ser segura, sem prejudicar a eficácia da RT. Em relação à resposta vascular ao protocolo proposto, análises de imagem por método de Tomografia de Coerência Óptica (OCT) mostraram que o grupo PBMT-RT apresentou um aumento de 20% no diâmetro no 9º dia após a primeira sessão de RT. No entanto, não foram observadas alterações significativas em termos de densidade vascular média. Esses resultados indicam que o mecanismo radiosensibilizante da PBMT provavelmente não ocorre por vias de angiogênese, mas sim de respostas fisiológicas frente a iluminação tumoral, como por exemplo, a vasodilatação observada. Esse fenômeno pode ser positivo no contexto oncológico, uma vez que se sabe que a angiogênese se relaciona com um aumento do potencial metastático do tumor. (3) Além disso, análises imuno-histoquímicas estão em andamento para avaliar as áreas hipóxicas dos tumores submetidos ao protocolo combinado PBMT-RT, com o objetivo de avaliar

se a variação do diâmetro observada levou a uma alteração quantitativa de áreas hipóxicas do tecido tumoral.

Palavras-chave: Radioterapia. Fotobiomodulação. Vascularização.

Agência de fomento: CNPq (160861/2021-7)

Referências:

- 1 DE FARIA, C. M. G.; BARRERA-PATÍÑO, C. P.; SANTANA, J. P. P.; DA SILVA DE AVÓ, L. R.; BAGNATO, V. S. Tumor radiosensitization by photobiomodulation. **Journal of Photochemistry and Photobiology B: biology**, v. 225, p. 112349, 2021. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2021.112349.
- 2 SILVA, C. R.; DE ALMEIDA SALVEGO, C.; ROSTELATO, M. E.; ZEITUNI, C. A.; RIBEIRO, M. S. Photobiomodulation therapy combined with radiotherapy in the treatment of triple-negative breast cancer-bearing mice. **Journal of Photochemistry and Photobiology B: biology**, v. 220, p. 112215, 2021. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2021.112215.
- 3 MANUELLI, V.; PECORARI, C.; FILOMENI, G.; ZITO, E. Regulation of redox signaling in HIF-1-dependent tumor angiogenesis. **The FEBS Journal**, v. 289, n. 18, p. 5413–5425, 2021. DOI: 10.1111/febs.16110.

PG103

Evaluating photodynamic therapy with Protoporphyrin IX in the context of mitochondrial bioenergetics

MEZZACAPPO, Natasha Ferreira¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; INADA, Natalia Mayumi¹

natasha.mezzacappo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Protoporphyrin IX (PPIX) is an endogenous photosensitizer widely studied for its use in photodynamic therapy (PDT) in some types of skin cancer and dermatological diseases. (1) Administration of 5-aminolevulinic acid (ALA) induces the endogenous synthesis of PPIX in mitochondria, via the heme biosynthetic pathway, making mitochondria the primary target of PDT. (2) With that in mind, it is important to understand the effects and mechanisms of PDT with PPIX directly on mitochondria at the bioenergetic level. In this study, we isolated mitochondria from healthy C57BL/6 mice's livers and evaluated mitochondrial respiration and swelling after PDT treatment at 635 nm. We analyzed mitochondrial respiration using different PPIX concentrations (0.5, 1.0, 4.5, and 9.5 μM) and light doses (0.6, 1.2, and 1.8 $\text{J}\cdot\text{cm}^{-2}$) in the PDT treatment. At first, we tested the different PPIX concentrations with the lower light dose (0.6 $\text{J}\cdot\text{cm}^{-2}$) in respiration, and 0.5 μM was the only one we could not see any effect. Thus, we choose this PPIX concentration to test the different light doses. Overall, respiration after PDT treatment showed an increase in mitochondria proton leak, reducing the respiratory control ratio (RCR) and coupling efficiency, and promoting a partial loss of cytochrome c, proportionally higher as the PPIX concentration or light dose increased. Besides, it also promoted mitochondrial swelling due to the opening of the mitochondrial permeability transition pore. These results indicate that PDT using PPIX as a photosensitizer probably causes damage to mitochondrial membranes, impairing respiration, which can contribute to cell death afterward.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Bioenergética mitocondrial. Respiração mitocondrial.

Agência de fomento: CAPES (88887.511692/2020-00)

Referências:

- 1 KENNEDY, J. C.; POTTIER, R. H. New trends in photobiology. **Journal of Photochemistry and Photobiology B: biology**, v. 14, n. 4, p. 275–292, July 1992.
- 2 MORGAN, J.; OSEROFF, A. R. Mitochondria-based photodynamic anti-cancer therapy. **Advanced Drug Delivery Reviews**, v. 49, p. 71-86, 2001.

PG104

Sensoriamento quântico inercial com átomos de estrôncio

PESSOA JUNIOR, Claudio Alves¹; FRANÇA, Gustavo Henrique de¹; JEREZ, Yajaira Dalila Rivero¹; TEIXEIRA, Raul Celistrino²; COURTEILLE, Philippe Wilhelm¹

peessoa.claudio@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Departamento de Física - UFSCar

Este trabalho concentra-se nos fenômenos de interação luz-matéria moldados pela presença de uma cavidade óptica anelar com aplicações em sensoriamento quântico. Construímos um experimento para resfriar nuvens de átomos de estrôncio a temperaturas ultrabaixas próximas ao limite de recuo de um único fóton e armazená-los no potencial dipolar formado por um modo do laser da cavidade anelar, bombeado longe de uma estreita transição atômica. Os espectros de transmissão da cavidade exibem uma divisão dos modos normais do sistema átomo-cavidade, o que comprova que estamos no regime coletivo forte. Atualmente, estamos configurando um interferômetro de matéria de alta sensibilidade usando nuvens atômicas ultrafrias para sensoriamento inercial e gravimetria (1), seguindo duas rotas alternativas: a- usando uma sequência de pulsos Ramsey-Bordé, dividiremos e recombinaremos ondas de matéria de estrôncio em um interferômetro do tipo Mach-Zehnder. (2) A fase das franjas de interferência é muito sensível à presença de forças externas. b- Observando as oscilações de Bloch realizadas por átomos de estrôncio ultrafrios dentro de uma rede óptica periódica formada por dois modos contrapropagantes da cavidade anelar. A periodicidade das oscilações de Bloch é estritamente proporcional às forças externas.

Palavras-chave: Sensoriamento quântico. Cavidade anelar. Interferômetro de matéria.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 PETER, A.; CHUNG, K. Y.; CHU, S. High-precision gravity measurements using atom interferometry. *Metrologia*, v. 38, p. 25-61, 2001.
- 2 KAVESICH, M.; CHU, S. Measurement of the gravitational acceleration of an atom with a light-pulse atom interferometer. *Applied Physics B*, v. 54, n. 5, p. 321-332, May 1992.

PG105

Structural and biochemical characterization of SARS-CoV-2 main protease maturation process

GODOY, Andre Schutzer de¹; NOSKE, Gabriela Dias¹; OLIVA, Glaucius¹; FERNANDES, Rafaela Sachetto¹

gabriela.noske@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

SARS-CoV-2 is the causative agent of COVID-19 and responsible for the global pandemic. The viral Main Protease (Mpro) is responsible for cleavage of the viral polyproteins, including its own N and C-terminus, therefore is a key enzyme for viral cycle and one of the most promising targets for drug development. (1) The main objective of this project is the elucidation of the Mpro maturation process. Three different constructs of the enzyme were obtained: an immature form (IMT Mpro), a native form (Mpro) and an inactive mutant (C145S Mpro). Both proteins were purified and crystallized. In addition, the constructs were characterized using SEC-MALS, FRET-based activity assays and native mass spectroscopy. Using C154S Mpro, a 3.5Å cryo-EM structure was also obtained. (1) The crystal structure of IMT Mpro revealed several structural changes compared with native protein, including differences in the substrate binding pocket. Also, the enzyme exhibited significant reduced activity and monomeric in solution, contrasting with the native form. Furthermore, we solved the crystal structure of C145S Mpro, which reveal to be in complex with both N and C-terminal peptides. This construct presented both monomeric, dimeric, trimeric and tetrameric oligomeric states. (2) Moreover, the cryo-EM structure of tetrameric C145S Mpro was obtained in complex between non cleaved N-terminal peptide, revealing details of N-terminal processing. Native MS results exhibited the presence of both cleaved and non-cleaved particles, showing that N-terminal cleavage is not required for dimerization. Lastly, we investigated how different classes of inhibitors affect Mpro oligomerization. Our data indicates that a non-covalent inhibitor MAT-POS-e194df51-1 hinders dimer formation, meanwhile the covalent inhibitor Nirmatrelvir enhance dimerization (3), suggesting that induced fit caused by covalent linkage is responsible for Mpro dimerization. The elucidation of this process can be used to propose specific inhibitors targeting intermediate immature forms of Mpro.

Palavras-chave: Mpro. Maturation. SARS-CoV-2.

Agência de fomento: FAPESP (2018/25600-4)

Referências:

- 1 NOSKE, G. D. *et al.* An in-solution snapshot of SARS-COV-2 main protease maturation process and inhibition. **Nature Communications**, v. 14, n. 1, p. 1545-1-1545-13, 2023.
- 2 NOSKE, G. D. *et al.* A crystallographic snapshot of SARS-CoV-2 main protease maturation process. **Journal of Molecular Biology**, v. 433, n. 18, p. 167118-1-167118-16, Sept. 2021.

3 COVID MOONSHOT CONSORTIUM. **COVID Moonshot:** open science discovery of SARS-CoV-2 main protease inhibitors by combining crowdsourcing, high-throughput experiments, computational simulations, and machine learning. 2020. Disponível em: <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/60c751bd337d6c10fee285b1>. Acesso em: 7 jul. 2023.

PG106

Estudo de Gases Quânticos através da observação de Sólitons

HENN, Emanuel Alves de Lima¹; ATTIE, Jorge Antonio Gonçalves¹

jorge.attie@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Sólitons são ondas localizadas que se manifestam nos mais diversos meios, particularmente em condensados de Bose-Einstein onde fenômenos notáveis associados à observação dos mesmos podem aparecer. (1) O estudo de sistemas dessa natureza confinados em armadilhas com determinadas geometrias mostra-se especialmente interessante e promissor, como, por exemplo: em cascas esféricas com configurações radiais ajustáveis e em planos com curvaturas. (2-3) A proposta do projeto é estudar analiticamente e numericamente gases quânticos dipolares nas geometrias supracitadas através da observação de sólitons uni e bidimensionais. Além disso, deseja-se investigar também as interações entre os sólitons gerados.

Palavras-chave: Gases quânticos. Condensados de Bose-Einstein. Sólitons.

Agência de fomento: CAPES (88887.803630/2023-00)

Referências:

- 1 CORNISH, S. L.; THOMPSON, S. T.; WIEMAN, C. E. Formation of bright matter-wave solitons during the collapse of attractive bose-einstein condensates. **Physical Review Letters**, v. 96, p. 170401-1 - 170401-4, May 2006. DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.170401.
- 2 SUN, K. *et al.* Static and dynamic properties of shell-shaped condensates. **Physical Review A**, v. 98, p. 013609-1 - 013609-24, July 2018. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.013609.
- 3 PADAVIC, K. *et al.* Physics of hollow Bose-Einstein condensates. **Europhysics Letters**, v. 120, n. 2, p. 20004-p1 - p. 20004-p7, 2017. Disponível em: <http://stacks.iop.org/0295-5075/120/i=2/a=20004>.

PG107

Monte Carlo simulation proposal to narrow-line magneto-optical traps

HENN, Emanuel Alves de Lima¹; SANTOS, Bruno Nicolau¹

bruno.nicolau.santos@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

The deep understanding of light-matter interaction brought a myriad of scientific possibilities, such as improvements in atom interferometry, accurate spectroscopic methods, and control of ultracold gases. The 1997 Nobel Prize in Physics was awarded jointly to Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji, and William D. Phillips for developing methods to cool and trap atoms with laser light, also known as laser cooling. (1) The workhorse of laser cooling is the magneto-optical trap (MOT), a technique to trap and cool a dilute atomic gas. Briefly, the atoms in a magnetic quadrupole field scatter photons from a laser beam arrangement. The momentum exchange, which relies on the scattering events, yields a trapping and viscous force whose magnitude depends on the scattering rate. Such rate is related to the atomic linewidth Γ so that the lower Γ , the lower the minimum reachable temperature. An MOT operating with Γ close to the photonic recoil is known as a narrow-line magneto-optical trap (nMOT). (2) The current MOT theories based on Doppler cooling are limited to predicting quantities such as temperature and cloud size from analytical expressions. In many experiments, there is either the absence of theoretical predictions or the necessity of adjustable scaling factors. The difficulty arises from three-dimensional laser arrangement in the presence of a magnetic quadrupole field. (3) The case of nMOTs is even more delicate since gravity can be comparable with optical forces and, therefore, must be included. In this work, we proposed a Monte Carlo simulation in order to predict quantities of dysprosium and strontium nMOTs by considering as many parameters as possible. Our model relies on sampling atomic trajectories as a discrete stochastic process to infer probability distributions of position and velocity. We could predict the temperature, centre of mass, and cloud shape of dysprosium and strontium nMOTs in agreement with experimental data.

Palavras-chave: Magneto-optical trap. Monte Carlo simulation. Laser cooling.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 RAAB, E. L. *et al.* Trapping of neutral sodium atoms with radiation pressure. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 23, p. 2631-2634, 1987.
- 2 LOFTUS, T. H. *et al.* Narrow line cooling and momentum-space crystals. **Physical Review A**, v. 70, n. 6, p. 063413-1 - 063413-14, 2004.
- 3 PRUDNIKOV, O. *et al.* Three-dimensional theory of the magneto-optical trap. **Journal of Experimental and Theoretical Physics**, v. 120, n. 4, p. 587-594, 2015.

PG108

Dimensional crossover in Fermi gases with attractive interactions

MACÊDO-LIMA, Mathias¹; MADEIRA, Lucas¹

lmmathias@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Strongly-correlated systems are present in many phenomena in physics. From superconductors in condensed matter to superfluids in atomic physics, many-body strongly-interacting systems appear in several areas. The union of Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) and Bose-Einstein condensates (BEC) theories, which were once distinct paradigms, led to a better understanding of superconductivity and superfluidity: the so-called BCS-BEC crossover. (1) At the two-body level in three dimensions (3D), the interaction between two particles may lead to a bound state if the attractive potential is strong enough to bind them. In the context of a superfluid Fermi gas, this is called the BEC regime of bosonic dimers. On the other hand, for weak attractions, the superfluid phase is characterized by the formation of weakly-coupled Cooper pairs, the BCS regime. Between them lies the most strongly-interacting region of the entire crossover, the unitary regime. Controlling the interparticle interactions is the first step in investigating the BCS-BEC crossover. In cold atoms experiments, this is achieved with a technique known as Feshbach resonances. Numerically, we modeled the interactions using a short-range microscopic potential which can be tuned to reproduce the desired scattering length and effective range. (2) We continuously varied the interaction strength of different potentials to analyze the behavior of the scattering length. Regarding the dimensionality aspects, the crossover has been realized in three and two dimensions (2D). We propose to investigate a two-component Fermi gas when the dimensionality is varied from 3D to 2D with Quantum Monte Carlo (QMC) methods, which have been successfully applied to many strongly-interacting systems, including cold Fermi gases in the crossover. (3) We will introduce an external confining potential to reduce the size of the system in one direction. The system will eventually be in a quasi-2D regime as the external potential strength increases. This topic has important applications in cold atom systems and nuclear physics.

Palavras-chave: Quantum Monte Carlo. Cold Fermi gases. BCS-BEC crossover.

Agência de fomento: CNPq (131025/2022-8)

Referências:

1 RANDERIA, M.; TAYLOR, E. Crossover from Bardeen-Cooper-Schrieffer to Bose-Einstein condensation and the unitary Fermi gas. **Annual Review of Condensed Matter Physics**, v. 5, p. 209-232, Mar. 2014.

2 MACÊDO-LIMA, M.; MADEIRA, L. **Scattering length and effective range of microscopic two-body potentials**. 2023. DOI: 10.48550/arXiv.2303.04591.

3 ASTRAKHARCHIK, G. E. *et al.* Equation of state of a Fermi gas in the BEC-BCS crossover: a quantum Monte Carlo study. **Physical Review Letters**, v. 93, n. 20, p. 200404-1-200404-4, Nov. 2004.

PG109

Investigação da morte de células B16F10 in vitro com associação de radioterapia e terapia fotodinâmica

LOPES, Raphael Guimarães¹; MEDEIROS, Alexandra Ivo de²; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; RAIMUNDO, Breno Vilas Boas²; INADA, Natalia Mayumi¹

raphaelguimalopes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP; ²Universidade Estadual Paulista - UNESP

O melanoma é um tipo de câncer de pele que afeta os melanócitos, células especializadas na produção de melanina, pigmento que oferece proteção contra os raios ultravioleta (UV) do sol. Infelizmente, o melanoma é conhecido por sua alta capacidade de metástase, o que resulta em uma taxa de sobrevivência reduzida para os pacientes. (1) Dependendo das características do tumor, existem diversas opções terapêuticas disponíveis, incluindo ressecção cirúrgica, quimioterapia, radioterapia e imunoterapia. (2) No entanto, a resistência tumoral, que frequentemente resulta na falta de sucesso do tratamento, tem se tornado um problema de saúde pública significativo. (2) Em resposta a essa situação, a terapia fotodinâmica (TFD) e a radioterapia (RT) têm sido estudadas como abordagens que podem não só eliminar diretamente os tumores primários, como também, em combinação com a imunoterapia, induzir a morte celular imunogênica e ativar uma resposta imune antitumoral eficaz. (3) Portanto, nosso objetivo de pesquisa é investigar a morte celular in vitro das células B16F10 após a aplicação de radioterapia e terapia fotodinâmica, tanto de forma isolada como combinadas. Com base em estudos anteriores, foi usado uma clorina (Photoditazine® ou PDZ, composto comercial, aprovado para uso em seres humanos e produzido na Rússia) como fotossensibilizador (FS) e o comprimento de onda em 660 nm. Realizamos os experimentos de RT com 4 Gy e TFD com fluência de 2 J/cm² e concentração de PDZ de 5 µg/ml, para a combinação de ambas as terapias. Para análise da atividade metabólica relativa, foi utilizado o teste colorimétrico do sal de MTT após 24 horas de tratamento. A técnica de citometria de fluxo foi utilizada para analisar o tipo de morte celular causada pelo tratamento. Foi considerado o intervalo entre a aplicação das terapias, tempos de 24 e 48 horas, utilizando os parâmetros citados acima. Como resultado podemos observar que o protocolo de 48 horas para o grupo combinado (RT+TFD) apresentou diferença significativa em relação aos demais grupos de tratamento e obteve uma maior taxa de morte de células B16F10 quando comparado ao intervalo de 24 horas, demonstrando assim uma melhor eficiência entre os dois protocolos. A análise de citometria de fluxo do grupo de 48 horas apresentou uma taxa de morte celular por apoptose de 37%. A associação das terapias e o maior intervalo de tempo entre as aplicações se mostraram mais eficazes em células B16F10, quando comparado ao efeito das técnicas realizadas de forma isoladas. Além disso, o protocolo de 48 horas entre terapias apresentou uma taxa de apoptose promissora para a ativação do sistema imunológico. Mais parâmetros são necessários para avaliar a eficácia da ativação do sistema imunológico, como a liberação de moléculas sinalizadoras imunogênicas, a ativação de células imune específicas e a resposta imune global, que estão previstos para projetos futuros.

Palavras-chave: Melanoma. Radioterapia. Terapia fotodinâmica.

Agência de fomento: CAPES (88887.684735/2022-00)

Referências:

- 1 HUANG, Ying-Ying *et al.* Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry**, v. 394, n. 2, p. 239-250, 2013.
- 2 DAMYANOV, C. A. *et al.* Conventional treatment of cancer realities and problems. **Annals of Complementary and Alternative Medicine**, v. 1, n. 1, p. 1002-1 – 1002-9, 2018.
- 3 DUAN, X.; CHAN, C.; LIN, W. Nanoparticle-mediated immunogenic cell death enables and potentiates cancer immunotherapy. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 58, p. 670-680, July 2018.

PG110

Análise multiparamétrica do problema de fases em cristalografia de proteínas por aprendizado de máquina - Caso de estudo: lisozima da clara do ovo de galinha

JUCOVSKI, André Gustavo¹; AMBROSIO, Andre Luis Berteli¹

andre.jucovski@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O problema de fases é notório na cristalografia de proteínas por difração de raios-X. A perda experimental de informações sobre as fases das ondas espalhadas construtivamente pelos componentes do cristal se devem às limitações tecnológicas intrínsecas aos sistemas de detecção dessa radiação. (1) Assim, é impossibilitado o cálculo direto da função de distribuição de densidade eletrônica na cela unitária através de uma transformada de Fourier. Atualmente, há dois métodos experimentais que podem ser aplicados para contornar esse problema: (i) a quantificação seletiva do componente dispersivo (λ -dependente) do fator de espalhamento atômico ou (ii) a substituição parcial do solvente aquoso ordenado por íons mais elétron-densos (metálicos ou halogênicos). (2) Alternativamente, informações prévias, na forma de estruturas cristalinas conhecidas que são funcionalmente relacionadas ou homólogas a componentes no cristal, podem servir como fonte de um conjunto inicial de fases. Apesar de desafiadoras, quando viáveis, as aplicações desses diferentes métodos já possibilitaram a determinação de mais de uma centena de milhares de modelos atômicos, para as mais diversas proteínas (e seus complexos). Tendo em vista a existência de uma vasta coleção de informações estruturais já disponibilizadas no banco de dados Protein Data Bank, propõe-se aqui uma análise multiparamétrica do problema das fases, com base em aprendizagem de máquina profunda (AMP). (3) Nossa hipótese é a de que o extensivo mapeamento estatístico de observações sobre distribuições de fases conhecidas, como um modelo preditivo, pode permitir conclusões sobre o valor alvo de fases em conjuntos de dados ainda não resolvidos, eliminando assim a necessidade de experimentos adicionais ou de estruturas homólogas previamente conhecidas. Assim, neste Projeto de Mestrado, estão sendo testados modelos para um seletivo grupo de estruturas de lisozimas provenientes da clara do ovo de galinhas (da sigla HEWL, do inglês Hen egg-white lysozyme), no sentido de avaliar a aplicabilidade e sua reprodutibilidade para outras estruturas no futuro. Até este momento foi obtido êxito em realizar um ciclo completo, isto significa que foi possível a saída da predição das fases por AMP e a utilização destas para a reconstrução dos mapas de densidade eletrônica (MDE). Foi desenvolvido um modelo de predição que possui uma acurácia média de 15-20 graus. Agora tem-se como objetivo refinar ainda mais o modelo e desenvolver uma avaliação quantitativa da fidelidade dos MDEs.

Palavras-chave: Aprendizado de máquina. Cristalografia. Problema de fases.

Agência de fomento: CAPES (88887.675055/2022-00)

Referências:

- 1 DRENTH, J. **Principles of protein X-ray crystallography**. 3. ed. New York: Springer, 2007. 332 p.
- 2 RUPP, B. **Biomolecular crystallography**: principles, practice, and application to structural biology. New York: Garland Science, 2010. 809 p.
- 3 GÉRON, A. **Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow**: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, 2017. 547 p.

PG111

Termodinâmica de condensados de Bose-Einstein: equação de estado empírica e alguns ciclos associados

BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; MARTINS, Edmur Braga¹

ed_uspi1@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No presente trabalho, foi utilizado uma equação de estado empírica para estudar gases quânticos como os condensados de Bose-Einstein. (1) A espécie atômica em questão foi o rubídio, Rb87. Esta equação é representada por uma grandeza física chamada de parâmetro de pressão, cujo gráfico com a temperatura ilustra o comportamento energético do sistema. Outra quantidade associada do modelo de estudo é o volume harmônico que junto com a pressão nos fornece a energia do sistema. A equação de estado empírica é composta pelos seguintes elementos: Parâmetro de pressão, temperatura e coeficientes. O parâmetro de pressão e a temperatura são obtidos experimentalmente. Um diagrama dessas duas quantidades pode ser obtido usando uma grande quantidade de pontos. Em seguida, um ajuste é realizado para obter os coeficientes. Uma vez que se tenha os coeficientes, que são fixos, a equação pode ser obtida em função da temperatura. Também, o estudo pode ser realizado com a variação do volume harmônico. Com a equação de estado e o volume harmônico, os ciclos termodinâmicos podem ser obtidos. Ciclos do regime clássico podem ser refletidos e estudados no regime quântico. Como exemplo, temos os ciclos de Carnot, Otto e Stirling, entre outros. A eficiência de cada ciclo também pode ser calculada. Em relação aos condensados de Bose-Einstein, eles têm uma transição de fase quântica e os ciclos podem ser estudados antes, durante e depois da transição. Com isso é possível notar se há mudança de comportamento ou não na região da transição.

Palavras-chave: Termodinâmica. Condensados de Bose-Einstein. Ciclos.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

1 MIOTTI, M. P. **Termodinâmica técnica de um gás inomogênio ao redor da transição de Bose-Einstein usando o método das variáveis globais**. 2021. 165p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

PG112

Pathway toward catastrophe: cellular dynamics on hit-to-lead compound optimisation for current drug discovery pipelines

SOUZA, Matheus da Silva¹; MEIRING, Joyce C. M.²; IYER, Saishree²; SILVA, Thiago Sabino da³; MASS, Eduardo Bustos⁴; COELHO, Fernando³; RUSSOWSKY, Dennis⁴; GRIGORIEV, Ilya²; AKHMANOVA, Anna²; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

msouza@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Utrecht University; ³Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP; ⁴Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS

Microtubules (MTs) are intracellular polymers that act as fundamental components of eukaryotic cells. Recent advances in protein purification techniques have begun to shed light on the importance of MTs intrinsic dynamic properties such as growth and shrinkage—both regulated by a cohort of molecular motors and microtubule-associated proteins. The dynamic instability of the MT cytoskeleton is crucial for cell division and motility, core processes that underpin abnormal behaviour in cancer development. (1) Within this framework, we have been carrying out in Brazil a PhD project entitled “Discovery of New Bioactive Ligands with Anticancer Properties” (FAPESP grant 2018/25289-7), working on MT-targeting agents for the treatment of triple-negative breast and hormone-refractory prostate cancers—both of which are metastatic. From a set of thirty-two initial compounds, ten passed the screening involving a series of assays: cell proliferation, migration, and invasion; experimental determination of pharmacokinetic parameters; tubulin polymerisation and site competition. The compounds’ effect on tubulin polymerisation was found to be inhibitory, i.e., they promote destabilisation by favouring the switch from growing to shrinking (“catastrophes”) at MT assembly in the colchicine binding site. (2) That said, here we describe the research proposal outcomes of the effects of these hit-compounds on MT dynamics, during a Research Internship Abroad programme under the supervision of Prof. Dr. Anna Akhmanova at Utrecht University. For those samples, using time-lapse microscopy, kymographs were generated to annotate and quantify MT dynamics both in cells and in *in vitro* reconstitutions. At Prof. Akhmanova’s laboratory, the conjunction of cellular expertise and advanced microscopy made possible to perform several experiments that were significant for our already screened compounds, in order to select those that will be forwarded for pre-clinical trials with animal models and thus, to elect the lead ones. Here, we used live-cell imaging and *in vitro* reconstitution assays to show that the **cis-2e**.indolizine lactone and **para-3c**.quinazoline-chalcone hybrid indeed inhibit MT polymerisation and they are the most potent representative for each respective chemical series. Both induced catastrophes in cells stably expressing EB3-GFP and led to a decrease in the growth rate (Gr) [**Gr(cis-2e)**. 6.76 ± 0.44 ; **Gr(para-3c)**. 8.15 ± 0.44] and an increase in the catastrophe frequency (Cf) [**Cf(cis-2e)**. 8.92 ± 0.64 ; **Cf(para-3c)**. 7.38 ± 0.39] in comparison with the negative control (nc) and the vehicle DMSO 0.1% (v) [**Gr(nc)**. 20.59 ± 1.95 ; **Gr(v)**. 20.98 ± 1.10 ; **Cf(nc)**. 2.94 ± 0.25 ; **Cf(v)**. 2.87 ± 0.15]. Furthermore, in *in vitro* reconstitution assays, they led to a mild decrease in the growth rate [**Gr(cis-2e)**. 1.46 ± 0.17 ; **Gr(para-3c)**. 1.97 ± 0.22] whilst resulted in more frequent catastrophes [**Cf(cis-2e)**. 1.75 ± 0.11 ; **Cf(para-3c)**. 0.82 ± 0.10] in comparison with the negative ones [**Gr(nc)**. 2.91 ± 0.45 ; **Gr(v)**. 2.66 ± 0.20 ; **Cf(nc)**. 0.49 ± 0.05 ; **Cf(v)**. 0.51 ± 0.07]. Our results suggest that the novel compounds

contribute to the non-maintenance of microtubule integrity, with values tending towards the positive control colchicine (col) in both assays [cells: **Gr(col)**. 6.07 ± 0.63 ; **Cf(col)**. 9.99 ± 1.04 / *in vitro*. **Gr(col)**. 1.59 ± 0.17 ; **Cf(col)**. 1.72 ± 0.11]. (3)

Palavras-chave: Cancer. Cellular dynamics. Microtubules.

Agência de fomento: FAPESP (2018/25289-7 e 2022/00219-1)

Referências:

- 1 RUGGIERO, C.; LALLI, E. Targeting the cytoskeleton against metastatic dissemination. **Cancer and Metastasis Reviews**, v. 40, p. 89-140, 2021. DOI: /10.1007/s10555-020-09936-0.
- 2 AKHMANOVA, A.; HOOGENRAAD, C. C. Microtubule plus-end-tracking proteins: mechanisms and functions. **Current Opinion in Cell Biology**, v. 17, n. 1, p. 47-54, 2005. DOI: 10.1016/j.ceb.2004.11.001.
- 3 BOHNACKER, T. *et al.* Deconvolution of Buparlisib's mechanism of action defines specific PI3K and tubulin inhibitors for therapeutic intervention. **Nature Communications**, v. 8, p. 14683–14695, 2017.

PG113

Instrumentação eletrofisiológica dedicada não-invasiva aplicada para a caracterização da sensibilidade visual de peixes elétricos de campo fraco

PINTO, Reynaldo Daniel¹; BELLINI, Beatriz Saiani¹

beatriz.bellini@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Gymnotus carapo é uma espécie de peixe elétrico pulsador de campo fraco que possui um órgão gerador de pulsos elétricos e células sensoriais específicas chamadas de eletroreceptores capazes de detectar campos elétricos produzidos pelo próprio animal e oriundos de outras fontes, constituindo o que pode ser considerado um “sentido elétrico”. (1) Por conta disso, estes animais são capazes de mapear seus arredores através da interpretação de deformações no campo elétrico autogerado e estabelecer comunicação com seus coespecíficos. (2) Esses animais são muito sensíveis a estímulos de diversas naturezas, reagindo imediatamente a novas percepções com acelerações transientes dos pulsos de seu órgão elétrico, o que é conhecido como *Novelty Response* (NR). (3) Entretanto, enquanto o sentido elétrico já foi caracterizado em diversos trabalhos, outras modalidades sensoriais foram pouco exploradas. Além disso, mesmo que a NR seja um comportamento natural conhecido há várias décadas, sua utilização para inferir a percepção de outras modalidades sensoriais é uma novidade que só foi possível com a aplicação de técnicas experimentais, desenvolvidas em nosso laboratório, que não restringem os movimentos do animal no aquário de experimentos. Dessa forma, este trabalho visa quantificar de maneira não invasiva a sensibilidade visual de *G. carapo* em relação a diferentes estímulos luminosos, utilizando as NRs como indicação de que os estímulos foram percebidos pelos animais. Para isso, foi desenvolvido um aparato experimental capaz de gerar estímulos luminosos com comprimentos de onda correspondentes ao infravermelho, vermelho, verde e azul, e em dois valores de intensidade. Além da apresentação dos estímulos em uma ordem aleatória e durante um longo período de tempo, o setup permite a gravação do sinal elétrico dos animais. Os resultados obtidos indicam que a espécie tem sensibilidade para os comprimentos de onda no espectro visível apresentados, em ambas as intensidades luminosas. Os próximos passos do projeto consistem em realizar alterações no aparato experimental para que seja possível determinar a localização dos animais durante o experimento, e garantir que eles estejam em uma posição em que possam visualizar diretamente os estímulos.

Palavras-chave: *Gymnotus carapo*. Novelty response. Sistema visual.

Agência de fomento: CAPES (88887.684446/2022-00)

Referências:

1 CASTELLÓ, M. E. *et al.* Electoreception in *Gymnotus carapo*: pre-receptor processing and the distribution of electroreceptor types. **Journal of Experimental Biology**, v. 203, n. 21, p. 3279-3287, 2000.

2 VON DER EMDE, G. Active electrolocation of objects in weakly electric fish. **Journal of Experimental Biology**, v. 202, pt. 10, p. 1205-1215, May 1999.

3 CAPUTI, A. A.; AGUILERA, P. A.; CASTELLÓ, M. E. Probability and amplitude of novelty responses as a function of the change in contrast of the reafferent image in *G. carapo*. **Journal of Experimental Biology**, v. 206, n. 6, p. 999-1010, 2003.

PG114

Spontaneous scalarization of self-gravitating magnetic fields.

BRIHAYE, Yves¹; HARTMANN, Betti²; CAPOBIANCO, Rogério Augusto³

rogerio.capobianco@gmail.com

¹Université de Mons; ²University College London; ³Instituto de Física de São Carlos - USP

The phenomenon known as Spontaneous Scalarization arises once a certain threshold in curvature is exceeded. It is triggered by an instability on the scalar field system that can lead to a stable scalarized solution. In this work, we show that an extended, self-gravitating system, which is static, cylindrically symmetric, and possesses electromagnetic fields, can undergo spontaneous scalarization. We demonstrate that a real massive scalar field condenses on the Melvin Magnetic Universe when introducing a non-minimal coupling between the scalar field and (a) the magnetic field, and (b) high-order curvature terms, respectively. We found that in both cases the solution exists on a finite interval of the coupling constant and solutions with a number of nodes, k , in the scalar field, exist. For case (a) we observe that the intervals of existence are mutually exclusive for different nodes. For a more detailed explanation check and references therein. (1)

Palavras-chave: Gravity. Spontaneous scalarization. Scalar field.

Agência de fomento: CAPES (88887.371717/2019-00)

Referências:

1 YVES, B.; CAPOBIANCO, R.; HARTMANN, B. Spontaneous scalarization of self-gravitating magnetic fields. **Physical Review D**, v. 103, n. 12, p. 124020, 2021.

PG115

Análise teórica das condições de nucleação sobre as bicamadas fosfolipídicas das membranas celulares para aplicação da Terapia Sonodinâmica

CUMPALLI, Alejandra Ayulo¹; PRATAVIEIRA, Sebastião¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; ANTUNES, Camila Aparecida¹

alejandraayulo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Sonodinâmica (TSD) é uma nova técnica para o tratamento do câncer, que utiliza ultrassom (US) e um fármaco denominado sonossensibilizador (SS), que podem causar efeitos sonomecânicos e sonoquímicos, levando à necrose ou apoptose de células. (1) O US é uma onda mecânica e sua ação pode ocorrer na bicamada fosfolipídica das membranas celulares (BFMC), a estrutura básica da célula. Um desses efeitos é o fenômeno denominado nucleação, caracterizado pela formação de bolhas de gás e vapor. A BFMC é indispensável para a função celular, e é possível que diversos gases possam se acumular ali, atingindo concentrações que podem levar à nucleação. A interação entre o gás e a BFMC foi validada por dados que mostraram que alguns gases possuíam uma solubilidade maior na bicamada do que na água (que corresponde ao elemento em maior concentração dentro e fora das células). (2) Esses gases tendiam a se concentrar em regiões específicas do lipídio, como no centro da bicamada, potencializando o fenômeno da nucleação. Além disso, a menor tensão superficial da membrana, quando comparado com a água, facilita o processo de nucleação na BFMC. Existem dois tipos de nucleação: homogênea e heterogênea. A nucleação homogênea ocorre quando as bolhas são formadas em meios sem impurezas ou imperfeições, a partir de uma transição de fase (líquido - vapor). A formação de bolhas neste caso está diretamente relacionada à tensão superficial da BFMC, indicando a quantidade necessária de energia para a geração de bolhas. À medida que a tensão superficial das BFMC diminui, a energia necessária para a formação das bolhas também diminui, facilitando a sua formação. Ademais, esse fenômeno também depende das pressões acústicas incidentes e do raio inicial da bolha que está sendo formada, e pode ser descrito matematicamente pela teoria clássica de nucleação (TCN). A partir de correções na TCN pode-se descrever a nucleação heterogênea, que ocorre quando as bolhas são formadas por meio de perturbações na membrana em meios com heterogeneidades, como, por exemplo, devido à presença de gases dissolvidos. Além disso, a nucleação heterogênea também depende de outros fatores tais como a compressibilidade, flexibilidade e elasticidade das BFMC. A tensão superficial das membranas celulares, tanto em células saudáveis quanto cancerígenas, é importante para a formação das bolhas nas BFMC. (3) Os tumores apresentam uma tensão superficial menor em comparação com as células saudáveis, o que pode resultar em uma nucleação mais rápida e, conseqüentemente, em um aumento da mortalidade celular quando submetidos ao US. Porém, é importante destacar que existem diferenças na composição e organização das membranas de células saudáveis e cancerígenas, que desempenham um papel significativo no processo de nucleação. Portanto, este estudo visa entender, se ocorre nucleação a partir das condições do ultrassom utilizado na TSD, e como as características das células influenciam esse processo. Dessa forma, será possível esclarecer os efeitos citotóxicos da técnica e, por consequência, permitir sua aplicação no cenário clínico.

Palavras-chave: Terapia Sonodinâmica. Nucleação. Bicamadas lipídicas das membranas celulares.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 FOGLIETTA, F. *et al.* Sonodynamic treatment induces selective killing of cancer cells in an in vitro co-culture model. **Cancer**, v. 13,n. 15, p.3852, Jul. 2021.
- 2 WRENN, S. P.; SMALL, E.; DAN, N. Bubble nucleation in lipid bilayers: a mechanism for low frequency ultrasound disruption. **Biochimica et Biophysica Acta**, v. 1828, n. 4, p. 1192-1197, Apr. 2013.
- 3 PONTES, B. *et al.* Membrane elastic properties and cell function. **PloS One**, v. 8, n. 7, p. e67708, 2013.

PG116

Análise das propriedades físico-químicas do surfactante pulmonar na terapia fotodinâmica antimicrobiana: desafios e perspectivas no combate à infecção por *Streptococcus Pneumoniae*

TOVAR, Johan Sebastián Díaz¹; LIMA, Isabelle Almeida de¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; FIUZA, Lorraine Gabriele¹; KURACHI, Cristina¹; INADA, Natalia Mayumi¹

lorrainefiuza@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As infecções do trato respiratório, como a pneumonia, representam uma das principais causas de mortalidade e morbidade globalmente. A pneumonia bacteriana provoca inflamação nos alvéolos, levando ao acúmulo de líquido nos pulmões e dificuldades respiratórias. Diante da ineficácia dos tratamentos convencionais e do aumento da Resistência Antimicrobiana (RAM), a Terapia Fotodinâmica Antimicrobiana (TFDa) surge como uma alternativa promissora. A TFDa tem apresentado excelentes resultados *in vitro* e em estudos clínicos, mostrando ação em múltiplos alvos celulares com alta seletividade e caráter pouco ou não invasivo. Nossos estudos, conduzidos pelo grupo de pesquisa, demonstraram a eficiência e segurança de um protocolo para fotoinativação de *Streptococcus pneumoniae* *in vitro*, bem como a entrega de luz e fotossensibilizador em modelos animais (Kassab *et al.*, 2020). (1) Entretanto, a redução de microrganismos *in vivo* ainda apresenta desafios a serem superados, principalmente devido à presença do surfactante pulmonar (SP). Assim, este trabalho tem como objetivo analisar as propriedades físico-químicas do SP para compreender o seu impacto na TFDa. Em estudos conduzidos, foram utilizadas formulações contendo 1-bromperfluorooctano (PFB) e Pluronic® F-127 para a entrega de indocianina verde (ICG). Observou-se que no grupo controle, composto por ICG e o surfactante pulmonar clínico Survanta®, a terapia fotodinâmica antimicrobiana (TFDa) não estava sendo inibida, conforme demonstrado anteriormente em ensaios *in vitro*. Simulações dinâmicas moleculares realizadas pelo grupo anteriormente (Kassab *et al.*, 2022) mostraram que o principal fosfolípido que se associa à ICG é a dipalmitoilfosfatidilcolina (DPPC). (2) Portanto, amostras de Survanta® com diferentes datas de fabricação foram submetidas a análises em cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas (LC-MS), onde foi possível quantificar o DPPC, correspondente ao íon m/z 735. Verificou-se que as amostras mais antigas continham quantidades menores de DPPC, o que pode explicar a falta de inibição da TFDa pelo Survanta®. Além disso, foram realizadas análises de tensão superficial do Survanta®, revelando uma variabilidade e aumento da tensão em amostras mais antigas, indicando a perda de integridade. Portanto, é necessário utilizar o conteúdo dos frascos de Survanta® em no máximo 15 dias para garantir a precisão dos resultados. Adicionalmente, a influência da concentração de DPPC na inibição da TFDa utilizando ICG foi avaliada, confirmando a importância desse componente no surfactante pulmonar para a eficácia da terapia, conforme demonstrado nas simulações anteriores. Os resultados deste estudo ressaltam a necessidade de pesquisas adicionais para aprimorar a eficácia da TFDa e explorar novas estratégias terapêuticas no combate à infecção por *Streptococcus pneumoniae*.

Palavras-chave: Pneumonia bacteriana. Terapia fotodinâmica antimicrobiana. Surfactante pulmonar.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 KASSAB, G. *et al.* Safety and delivery efficiency of a photodynamic treatment of the lungs using indocyanine green and extracorporeal near infrared illumination. **Journal of Biophotonics**, v. 13, n. 10, e202000176-1-e202000176-13, Oct. 2020.

2 KASSAB, G. *et al.* Lung surfactant negatively affects the photodynamic inactivation of bacteria-in vitro and molecular dynamic simulation analyses. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 119, n. 25, p. e2123564119, 2022.

PG117

Aprimoramento da terapia fotodinâmica antimicrobiana inibida pelo surfactante pulmonar através da combinação com ultrassom de baixa frequência

KURACHI, Cristina¹; JESUS, Lorraine Gabriele Fiuza de¹; INADA, Natalia Mayumi¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; LIMA, Isabelle Almeida de¹

isabelle.almeida@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A pneumonia é uma das principais causas de morte em todo o mundo e frente ao aumento dos microrganismos resistentes aos antibióticos, faz-se necessário o uso de tratamentos alternativos com a Terapia Fotodinâmica Antimicrobiana (TFDa), que possui amplo espectro de ação e que até o momento não foi descrito resistência microbiana derivada dos processos foto-oxidativos. Estudos realizados por nosso grupo de pesquisa demonstraram a eficácia da entrega de fotossensibilizador (ICG) e luz (808 nm) em modelo animal, porém devido à presença do surfactante pulmonar (SP) nos alvéolos, o sucesso da terapia apresentou-se limitada, uma vez que o SP aprisiona a ICG, como demonstrado em análises de simulação dinâmica molecular e estudos *in vitro* contendo SP. (1) Uma estratégia promissora para aumentar a atividade da TFDa consiste em sua associação com ultrassom (US) de baixa intensidade e baixa frequência, que possui alta penetrabilidade nos tecidos e ação antimicrobiana comprovada. Assim, no presente trabalho, primeiramente foi avaliado o efeito da variação da intensidade do US (1 a 2 W/cm²) sob suspensões de *Streptococcus pneumoniae*. e posteriormente a combinação de TFDa com US foi empregada ($\lambda=808\text{nm}$, $D=20\text{J/cm}^2$, $f=1\text{MHz}$, 50%, $t=5\text{ min}$ ($f=100\text{Hz}$)). Nos estudos realizados, observou-se que ao se utilizar somente o US com 1,2 W/cm² há redução de 2 log₁₀ da carga bacteriana, e que a partir de 1,4 W/cm² há redução total. Dessa forma, optou-se pela intensidade de 1 W/cm² para combinação com TFDa. Os resultados demonstraram que o uso de 5 min de US anterior à TFDa é suficiente para promover elevada redução *in vitro* na presença de 5% (v/v) do surfactante pulmonar Curosurf®, em condições na qual as terapias isoladamente não são eficazes. Os mecanismos que explicam o aprimoramento da TFDa com US ainda não foram totalmente elucidados, podendo ser resultantes da combinação de vários fatores, como os efeitos cavitacionais e reações sonoquímicas. (2) Além destes efeitos, também é essencial investigar as causas e efeitos do US em células humanas. Para tal, nos estudos subsequentes, serão utilizados modelos *in vitro* mais completos, como o *transwell*. que permite melhor avaliar a dinâmica celular frente ao tratamento da infecção.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica antimicrobiana. Surfactante pulmonar. Ultrassom de baixa frequência.

Agência de fomento: FAPESP (2022/03965-6)

Referências:

1 KASSAB, G. *et al.* Lung surfactant negatively affects the photodynamic inactivation of bacteria –

in vitro and molecular dynamic simulation analyses. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 119, n. 25, p. e2123564119, Jun. 2022.

2 WANG, Y. *et al.* Enhanced antimicrobial activity through the combination of antimicrobial photodynamic therapy and low-frequency ultrasonic irradiation. **Advanced Drug Delivery Reviews**, v. 183, p. 114168, Apr. 2022.

PG118

Quantum tomography: unveiling quantum state and processes

DOMINGUES, Artur Venturelli¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹

artur.domingues@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

This poster delves into the concepts of quantum state and quantum process tomography, using NV centers as the primary system for demonstration of these concepts. The focus is on applying Bayesian inference and maximum likelihood estimations as data analysis processes within quantum systems. The presentation begins with an introduction to quantum state and quantum process tomography, emphasizing the challenges involved in characterizing and reconstructing quantum states and processes, as well as the importance of accurate measurements and statistical methods. NV centers, which are defects found in diamond crystals, serve as the experimental system for this study. The subsequent part of the presentation explores the practical implementation of Bayesian inference and maximum likelihood estimations for extracting meaningful insights from experimental data obtained through quantum state and quantum process tomography. (1-2) The presentation also investigates the potential application of transformers, known for their success in natural language processing, for data analysis and Hamiltonian estimation in the quantum domain. (3) By understanding these concepts, it is possible to gain insights into the practical applications of Bayesian inference, maximum likelihood estimations, and transformers, contributing to the accurate characterization of quantum systems.

Palavras-chave: Nitrogen-vacancy. Statistical inference. LLM.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 HINCKS, I.; GRANADE, C.; CORY, D. G. Statistical inference with quantum measurements: methodologies for nitrogen vacancy centers in diamond. **New Journal of Physics**, v. 20, n. 1, p. 013022-1-13022-39, Jan. 2018. DOI: 10.1088/1367-2630/aa9c9f.
- 2 VERDEIL, F.; DEVILLE, Y. **Unitary quantum process tomography with unreliable pure input states**. 2023. DOI: 10.48550/arXiv.2306.07867.
- 3 AN, Z. *et al.* **Unified quantum state tomography and hamiltonian learning using transformer models: a language-translation-like approach for quantum systems**. 2023. DOI: 10.48550/arXiv.2304.12010.

PG119

Estudos estruturais e bioquímicos de 10 enzimas com possível atividade de PET hidrolase oriundas de metagenoma antártico

GARRATT, Richard Charles¹; PEREIRA, Humberto D´Muniz¹; SCULACCIO, Susana Andréa¹; SANTILLAN, Jhon Antoni Vargas¹; CABREJOS, Diego Antonio Leonardo¹; FURTADO, Adriano Alves¹

adrianofurtado@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos últimos anos, os plásticos tornaram-se o produto industrial com maiores níveis acumulativos e a sua fragmentação é um dos maiores poluentes. O polietileno tereftalato (PET) é um dos materiais mais utilizados para a fabricação de garrafas descartáveis e tem sido foco estratégico de decomposição e ponto estratégico de mitigação da poluição. No entanto, os processos desenvolvidos até agora têm sido ineficientes. Com a descoberta de enzimas que degradam o PET, surge a oportunidade de sua aplicação biotecnológica na minimização desses problemas, otimizando sua eficiência catalítica. (1) Neste trabalho, estudamos 10 enzimas recombinantes da Antártida com potencial atividade catalítica contra PET, identificadas durante um levantamento metagenômico. Parâmetros de expressão e purificação de proteínas foram otimizados para cada uma das proteínas, desde o uso de cepas com características especiais ao uso de ATP para remoção de chaperonas contaminantes. (2) Ensaio de cristalização nos levaram a 8 cristais, dos quais 4 foram resolvidas com resoluções que variaram entre 2,32 Å e 1,2 Å. Análises das estruturas resolvidas foram realizadas revelando mudanças sequenciais e estruturais críticas, destas a presença de um domínio de ligação a carboidrato CBM se destaca, não estando presente naturalmente em nenhuma PETase conhecida. (3) Com a intenção de acumular um maior conhecimento sobre PETase, que poderia ser empregada na melhoria das enzimas para fins biotecnológicos, experimentos biofísicos e bioquímicos foram realizados, onde observamos comportamentos distintos tanto para a estabilidade térmica quanto para atividade.

Palavras-chave: PET. PETase. Cristalografia. Difração de raios X. CBM.

Agência de fomento: CAPES (88887.635854/2021-00)

Referências:

- 1 YOSHIDA, S. *et al.* A bacterium that degrades and assimilates poly (ethylene terephthalate). **Science**, v. 351, n. 6278, p. 1196-1199, 2016.
- 2 RIAL, D. V.; CECCARELLI, E. A. Removal of DnaK contamination during fusion protein purifications. **Protein Expression and Purification**, v. 25, n. 3, p. 503-507, 2002.
- 3 WEBER, J. *et al.* Interaction of carbohydrate-binding modules with poly (ethylene terephthalate). **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 103, n. 12, p. 4801-4812, 2019.

PG120

Identification of new metabolic enzymes with filament capacity defined by transmission electron microscopy

GARRATT, Richard Charles¹; DIAS, Sandra Martha Gomes²; AMBROSIO, Andre Luis Bertelli¹; SANTILLAN, Jhon Antoni Vargas¹; MACHADO, Raquel Arminda Martinez²

jvargas17@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Laboratório Nacional de Biociências - CNPEM

Self-assembly of metabolic enzymes into filaments and supramolecular structures coincides with metabolic changes and has been most widely described in bacteria and yeast, with few examples in mammalian cells. Currently, it is believed that the formation of non-membranous compartments may also play a critical role in regulating metabolic networks. (1) A recent study on filament-forming yeast enzymes showed a direct association between metabolic enzymes from connection points of a given main pathway with its metabolic arms to activate or inactivate a given enzyme in times of growth or stress, thus ensuring the metabolic flow to different destinations. Several of the enzymes previously detected in yeast are conserved in humans (2); however, these aggregated states have been functionally and structurally characterized only for a few of these homologs. (3) In this project, 14 human metabolic enzymes, homologous to yeast, will be evaluated for their ability to aggregate in vitro in response to the presence of substrate, product, and co-factors, using biophysical techniques that kinetic assays will complement. Finally, up to three of these enzymes will be selected for electron cryo-microscopy studies, with the objective of high-resolution structural determination.

Palavras-chave: Metabolic enzymes. Cryo-microscopy. Filaments.

Agência de fomento: CAPES (88887.803880/2023-00)

Referências:

- 1 LYNCH, E. M.; KOLLMAN, J. M.; WEBB, B. A. Filament formation by metabolic enzymes: a new twist on regulation. **Current Opinion in Cell Biology**, v. 66, p. 28-33, Oct. 2020.
- 2 PETROVSKA, I. *et al.* Filament formation by metabolic enzymes is a specific adaptation to an advanced state of cellular starvation. **eLife**, v. 3, p. e02409-1-e02409-19, 2014.
- 3 PROUTEAU, M.; LOWEITH, R. Regulation of cellular metabolism through phase separation of enzymes. **Biomolecules**, v. 8, n. 4, p. 160-1-160-14, Dec. 2018.

PG121

Study of the Galactic Center region and searches for dark matter with the Fermi Gamma-ray Space Telescope

BRAGA, Ana Vitoria de Almeida Martinheira¹; VIANA, Aion da Escossia Melo¹

ana.martinheira@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Indirect observations from typical rotation curves of spiral galaxies, gravitational lenses, the bullet cluster, baryon acoustic oscillations, among others, provide evidence for the existence of Dark Matter (DM) in the Universe. This DM is thought to be composed of a novel elementary particle that is neutral, stable, and non-baryonic in nature. The Weakly Interacting Massive Particle (WIMP) model proposes a candidate for the DM particle with masses ranging from GeV to TeV, and that, in high density environments of the Universe, could self-annihilate and produce, among other Standard Model particles, gamma rays. (1) The Galactic Center (GC) is an important source of gamma rays, with some known and cataloged objects that can produce such high energy emission. However, recent observations by the Fermi Large Area Telescope (Fermi-LAT) aboard the Fermi Gamma Ray Space Telescope, have indicated a level of gamma-ray radiation above the predicted models, known as the "Galactic Center GeV Excess", for which none of the cataloged sources can account for it. The chosen method to analyze its possible origin will be through the subtraction of the most updated background models, in order to recover the famous "Galactic Center GeV Excess" residual emission and interpret it in terms of a DM self-annihilation signal. (2). The objective of this work is to understand if the detected "excessive" radiation originates from an astrophysical object unknown until now or if it is due to the presence of DM in the GC, based on the data collected by Fermi-LAT. (3).

Palavras-chave: Dark matter. Gamma ray. Galactic Center.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

- 1 MCDONALD, J. Simultaneous generation of WIMP miracle-like densities of baryons and dark matter. **Physical Review D**, v.84, n.10, p.103514-1-103514-9, Nov. 2011.
- 2 DAYLAN, T. The characterization of the gamma-ray signal from the central Milky Way: a case for annihilating dark matter. **Physics of the Dark Universe**, v.12, p.1-23, 2016.
- 3 SU, M.; SLATYER, T. R.; FINKBEINER, D.P. Giant gamma-ray Bubbles from Fermi-LAT: active Galactic nucleus activity or bipolar Galactic wind? **Astrophysical Journal**, v.724, n.2, p.1044-1082, Dec. 2010.

PG122

Plasmonic biosensors based on AUNI/glass substrates using optical microscopy and machine learning image classification as detection methods

OITICICA, Pedro Ramon Almeida¹; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de¹; SCABINI, Leonardo Felipe dos Santos¹; BRUNO, Odemir Martinez¹; RIBAS, Lucas Correia²

praoitica@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas - UNESP

Optical biosensors with plasmonic substrates are typically used with detection methods based on spectral measurements with spectrometers and sophisticated optical instruments. To allow this type of biosensors in POC applications it is necessary to employ simple optical detection methods and data analysis. The use of optical microscopes as tools for measuring the response of the AuNI/glass biosensor devices can offer a simple alternative, as the images can be analyzed using machine learning (ML) algorithms for image classification. Here, we propose a system exploiting computer vision with ML, including Deep Learning algorithms, for microscopy image classification as measurement method for plasmonic genosensors. We demonstrate the use of ML for optical microscopy image classification of plasmonic substrates formed by AuNI/glass after surface modifications in a genosensor for SARS-CoV-2 virus. (1) The optical transmission microscopy images (40x magnification) were classified with Deep Learning and other ML algorithms. (2) The networks were able to distinguish the images of the genosensors after the interaction with SARS-CoV-2 ssDNA from those which interacted with non-complementary ssDNA sequences or other three control groups (clean, 11-MUA, Blank). The accuracy was 0.87 with up to 96.8% sensitivity. In summary, simple optical microscopy coupled with a deep neural and ML networks can be employed in detection using plasmonic genosensors. Further studies are required to help identify the optimal classification descriptors for plasmonic sensors and other biosensing applications.

Palavras-chave: Biosensors. Plasmonics. Machine learning.

Agência de fomento: CAPES ("Não se aplica")

Referências:

- 1 SOARES, J. C. *et al.* Detection of a SARS-CoV-2 sequence with genosensors using data analysis based on information visualization and machine learning techniques. **Materials Chemistry Frontiers**, v. 5, n. 15, p. 5658-5670, 2021.
- 2 RIBAS, L. C.; SÁ JUNIOR, J. J. M.; SCABINI, L. F. S.; BRUNO, O. M. Fusion of complex networks and randomized neural networks for texture analysis. **Pattern Recognition**, v. 103, p. 107189-1-107189-10, July 2020.

PG123

Refinando o momento magnético anômalo do múon no modelo padrão com decaimentos hadrônicos do tau e QCD na rede

MANSUR, Lucas Morethes¹; BOITO, Diogo¹

lucasmansur@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O momento magnético anômalo do múon, a_μ , é um dos observáveis mais precisamente conhecidos da física. A medição de a_μ em 2021 pelo experimento FNAL E989 (no Fermilab) confirmou uma tensão de 4.2σ entre o resultado experimental e as previsões do Modelo Padrão (SM) da física de partículas, fundamentada no uso de uma relação de dispersão baseada em dados para o cálculo das contribuições hadrônicas dominantes (1) Muito recentemente, um resultado completo para a contribuição hadrônica obtido com QCD na rede pela colaboração BMW foi publicado, e com este resultado, o valor baseado no SM é apenas 1.5σ menor do que o experimento. (2) Compreender as discrepâncias entre experimento e teoria, e entre os cálculos dispersivos e na rede, das contribuições hadrônicas para a_μ é uma das tarefas cruciais da física de partículas atualmente. Nesse projeto, pretendemos usar informações de dados do decaimento do tau em hádrons (3), combinados com resultados da rede para contribuições de quebra de isospin, a fim de examinar em detalhe e refinar o cálculo de a_μ no SM. No presente evento, vamos apresentar brevemente o observável a_μ , e as respectivas tensões entre previsões teóricas e resultados experimentais. Além disso, vamos mostrar como os decaimentos do τ estão relacionados com a_μ , e expor os resultados teóricos para $\tau \rightarrow (\text{léptons}) + \nu_\tau$ e $\tau \rightarrow (\text{hádrons}) + \nu_\tau$. Por fim, apresentaremos a técnica computacional adotada para a combinação e tratamentos de dados experimentais utilizados no projeto.

Palavras-chave: QCD. Decaimentos do tau. G-2.

Agência de fomento: FAPESP (2022/16553-8)

Referências:

- 1 ABI, B. *et al.* Measurement of the positive muon anomalous magnetic moment to 0.46 ppm. **Physical Review Letters**, v. 126, n. 14, p. 141801-1-141801-11, Apr. 2021.
- 2 BORSANYI, S. *et al.* Leading hadronic contribution to the muon magnetic moment from lattice QCD. **Nature**, v. 593, n. 7857, p. 51-55, Apr. 2021.
- 3 BOITO, D.; GOLTERMAN, M.; MALTMAN, K.; PERIS, S.; RODRIGUES, M. V.; SCHAAF, W. Strong coupling from an improved τ vector isovector spectral function. **Physical Review D**, v. 103, n. 3, p. 034028-1-034028-24, Feb. 2021.

PG124

Searching dark matter in galaxy clusters with high energy gamma-rays

VIANA, Aion¹; RAMOS, Maria Eliza de Melo¹

mariaeliza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Currently, the scientific community widely acknowledges that the primary component of the matter density in the Universe is an enigmatic entity known as *dark matter* (DM). It is hypothesized to consist of neutral, stable, and non-baryonic elementary particles. In regions of high matter density, such as the Universe's galaxy clusters, DM has the potential to undergo self-annihilation or decay, generating a significant gamma-ray (γ -ray) signal. Galaxy clusters are the largest gravitationally bound structures observed in the Universe, with DM accounting for approximately 80% of their total mass, while the remaining 15% and 5% are attributed to intracluster gas and galaxies, respectively. (1) Consequently, galaxy clusters represent promising candidates for hosting substantial high-energy γ -ray emissions resulting from DM interactions. The objective of this study is to investigate the differential γ -ray flux and a parameter known as the J-factor, which characterizes the distribution of DM in galactic halos. Based on the theory applied to our own Milky Way galaxy, we've extended it to encompass galaxy clusters. (2) The presence of substructures within the main halo of such targets, in the form of self-contained regions of enhanced DM density, can amplify the annihilation/decay signal, yielding a catalog of the largest J-factors. (3) This analysis also facilitates a comparison between the differential γ -ray flux and the sensitivity of current gamma-ray detectors, such as Fermi-LAT, as well as future observatories like the Cherenkov Telescope Array (CTA). Consequently, ground-based telescopes, which are still in the developmental stage, are being considered for their observation capabilities regarding these galaxy clusters with the most significant visible J-factors. The detectability of these observatories is an ongoing area of study, playing a crucial role in our future projects.

Palavras-chave: Dark matter. J-factor. Galaxy clusters.

Agência de fomento: FAPESP (2021/00131-4)

Referências:

- 1 BERTONE, G.; HOPPER, D. A history of dark matter. **Reviews of Modern Physics**, v. 90, n. 4, p. 045002-1-045002-32, Oct.-Dec. 2016.
- 2 CIRELLI, M. *et al.* PPPC 4 DM ID: a poor particle physicist cookbook for dark matter indirect detection. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2011, p. 051, Mar. 2011.
- 3 SÁNCHEZ-CONDE, M. A.; PRADA, F. The flattening of the concentration-mass relation towards low halo masses and its implications for the annihilation signal boost. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v. 442, n. 3, p. 2271-2277, Aug. 2014.

PG125

Descoberta de inibidores do complexo RNA polimerase dependente de RNA (RdRp) de SARS-CoV-2 como candidatos a compostos líderes para covid-19.

OLIVA, Glaucius¹; OLIVEIRA, Juliana Roberta Torini de Souza¹; GUIDO, Rafael Victório Carvalho¹; GODOY, Mariana Ortiz de¹

mortizdegodoy@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os vírus emergentes com potencial pandêmico representam uma ameaça constante para a saúde pública global. A infecção humana pelo novo coronavírus, COVID-19, resultou em uma pandemia sem precedentes. Até maio de 2023, foram registrados mais de 670 milhões de casos confirmados e mais de 6,8 milhões de mortes em todo o mundo. (1) O SARS-CoV-2 é um vírus de RNA de cadeia simples e polaridade positiva. Após entrar na célula, seu genoma viral é usado como mRNA para sintetizar poliproteínas virais pelos ribossomos, que são então clivadas por proteases para gerar proteínas não estruturais. Em seguida, são produzidos RNAs subgenômicos que impulsionam a produção de novos RNAs genômicos e proteínas estruturais necessárias para a formação de novos vírus. Esse processo de transcrição/replicação viral é mediado por um complexo de replicase composto por subunidades de proteínas não estruturais (nsp7-nsp12-nsp8), sendo a enzima nsp12 uma RNA polimerase dependente de RNA fundamental nesse complexo. A RNA polimerase dependente de RNA (RdRp) é um alvo promissor para fármacos antivirais devido à sua natureza exclusivamente viral e alto grau de conservação estrutural em comparação com outros coronavírus. (2) A proteína RdRp (nsp12) foi expressa em células de inseto usando o sistema de Baculovírus e posteriormente purificada em três etapas de cromatografia. As proteínas cofatoras foram expressas em sistema bacteriano e purificadas em dois passos de cromatografia. A atividade da polimerase, isoladamente e em complexo, foi avaliada usando uma técnica de medição direta que monitora o alongamento de um RNA modelo, utilizando a fluorescência de uma sonda intercalante (SYBR Green I - SGI). A formação do complexo aumenta consideravelmente a eficiência do processo de alongamento da cadeia peptídica. Até o momento, aproximadamente 160 compostos com potencial inibitório foram testados contra o complexo replicase. Esses compostos foram obtidos de coleções comerciais e da biblioteca disponível em nosso grupo. Alguns desses compostos já foram descritos na literatura como inibidores de RdRp de outros vírus, como Zika e Chikungunya. A maioria dos compostos testados não inibiu a atividade do complexo replicase, no entanto, identificamos quatro moléculas que demonstraram inibição promissora com valores de IC₅₀ na faixa de baixo micromolar (0,9 a 6,0 μ M). Os ensaios de deslocamento térmico (Differential Scanning Fluorimetry – DSF) revelaram alterações significativas na temperatura de fusão (T_m) da proteína em sua forma apo, em comparação com a proteína incubada com cada um desses quatro ligantes (3 a 20°C), indicando que a proteína apresenta afinidade pelos ligantes. Esses resultados abrem caminho para a descoberta de novos inibidores de RdRp como candidatos a fármacos antivirais.

Palavras-chave: SARS-Cov-2. RdRp. Inibidores.

Agência de fomento: CAPES (88887.506832/2020-00)

Referências:

- 1 YIN, W. *et. al.* Structural basis for inhibition of the RNA-dependent RNA polymerase from SARS-CoV-2 by remdesivir. **Science**, v. 368, n. 6498, p. 1499-1504, 2020.
- 2 LIPSITCH , M.; SWERDLOW, D. L.; FINELLI, L. Defining the epidemiology of Covid-19 : studies needed. **New England Journal of Medicine**, v. 382, n. 13, 1194-1196, 2020.

PG126

Efeitos opto-térmicos em microrressonadores e microcavidades WGM

MENDONÇA, Cleber Renato¹; MARQUES, Victor Antonio Siqueira¹

victoramcp@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A pesquisa está desenvolvendo a teoria da dinâmica opto-térmica dos microrressonadores, para assim obter uma visão analítica rigorosa de forma ainda não vista em publicações sobre o tema. Assim, o foco é o desenvolvimento teórico e a obtenção de conclusões gerais sobre a dinâmica que ocorre nos microrressonadores quando luz é acoplada. Nota-se que não há muitos estudos na área dos microdispositivos orgânicos e da dinâmica opto-térmica dessas estruturas. Assim, desenvolver teoricamente o comportamento da dinâmica optotérmica dos microrressonadores, é uma contribuição pertinente. A teoria básica por trás das temperaturas de equilíbrio dos microrressonadores acoplados foi desenvolvida, corrigindo algumas equações de artigos da bibliografia e fazendo discussões em relação a dinâmica opto-térmica, suas equações e metodologias de solução, que ou não são feitas ou são feitas superficialmente pela maioria da bibliografia. O comportamento oscilatório nessa dinâmica, foi modelado por um sistema de equações diferenciais ordinárias não lineares, de modo que diversas aproximações foram feitas e diversas técnicas de integração para obtenção de soluções analíticas aproximadas foram utilizadas. Entretanto, algumas equações precisam de comprovação experimental e a análise no plano de fases trouxe uma visão mais abrangente dessa dinâmica, fornecendo alguns resultados condizentes com a realidade. As equações analisadas são diferenciais não lineares interdependentes, de modo que não se encontrou solução por aproximação. Assim, a única forma de resolver as equações obtidas é por métodos computacionais. No entanto, a análise no plano de fases permite estimativas para períodos e regiões de oscilação do sistema sem a necessidade de realizar a solução computacional, o que é interessante, pois dado um método, nem sempre equações não lineares irão convergir. Assim, encontrar uma metodologia essa estimativa não seria válida apenas para casos específicos. As demonstrações analíticas do equilíbrio trouxeram conclusões pouco discutidas na literatura, de forma que essas conclusões foram confirmadas pela análise linear no plano de fases e pelos resultados experimentais da bibliografia. Algumas das conclusões principais são que pode haver 1 ou 3 pontos de equilíbrio, mas sempre, 1 e apenas 1 será estável; se o sistema aumentar muito a absorção de energia, o ponto de equilíbrio estável pode deixar de existir; a temperatura de equilíbrio estável é sempre superior a ambiente, o que mostra que o sistema possui a tendência de esquentar, como verificado experimentalmente; para os coeficientes usuais dos materiais utilizados para a fabricação dos microrressonadores, provou-se que sempre há situações em que há ponto de equilíbrio estável; o fator “a” é uma medida do quanto do quanto as propriedades do microrressonador alteram conforme o calor é absorvido; fator “a” negativo pode gerar um *blueshift* ao aquecer o microrressonador. Também se confirmou que caso haja ponto de equilíbrio estável em torno do qual acontece uma dinâmica de equilíbrio, ele é único. Por conseguinte, a pesquisa já está caminhando para a finalização do processo de desenvolvimento da análise no plano de fases para curvas limite. De modo que, a pesquisa pretende confirmar algumas conclusões experimentalmente, para reforçar e validar as conclusões teóricas que serão colocadas na tese. (1-3)

Palavras-chave: Dispositivos fotônicos. Microrressonadores. Efeitos opto-térmicos.

Agência de fomento: FAPESP (2020/09022-0)

Referências:

- 1 CARMON, T.; YANG, L.; VAHALA, K. J. Dynamical thermal behavior and thermal self-stability of microcavities. **Optics Express**, v. 12, n. 20, p. 4742-4750, 2004.
- 2 DENG, Y. *et al.* Thermo-optomechanical oscillator for sensing applications. **Optics Express**, v. 21, n. 4, p. 4653-4664, 2013.
- 3 TOMAZIO, N. B. **Direct laser writing of high-Q polymeric microresonators for Photonics**. 2020. Tese(Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

PG127

Sensitivity to keV-MeV dark matter from cosmic-ray scattering

VIANA, Aion da Escóssia Melo¹; REIS, Igor¹; MOULIN, Emmanuel²

igorreis@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Université Paris-Saclay - Gif-sur-Yvette - France

A wealth of astrophysical and cosmological observational evidence shows that the matter content of the universe is made of about 85% of non-baryonic dark matter. Huge experimental efforts have been deployed to look for the direct detection of dark matter via their scattering on target nucleons, their production in colliders, and their indirect detection via their annihilation products. (1) Inelastic scattering of high-energy cosmic rays off dark matter particles populating the Milky Way halo would produce secondary gamma rays in the final state from the decay of the neutral pions produced in such interactions, providing a new avenue to probe dark matter properties. (2) We compute here the sensitivity for H.E.S.S.-like observatory, a current-generation ground-based Cherenkov telescopes, to the expected gamma-ray flux from collisions of Galactic cosmic rays and dark matter in the center of the Milky Way. We also derive sensitivity prospects for the upcoming Cherenkov Telescope Array (CTA) and Southern Wide-field Gamma-ray Observatory (SWG0). The expected sensitivity allows us to probe a poorly-constrained range of dark matter masses so far, ranging from keV to sub-GeV, and provide complementary constraints on the dark matter-proton scattering cross section traditionally probed by deep underground direct dark matter experiments.

Palavras-chave: Dark matter. Cosmic rays. Galactic center.

Agência de fomento: FAPESP (2021/02027-0)

Referências:

- 1 ABDALLA, H. *et al.* Search for dark matter annihilation signals in the H.E.S.S. inner galaxy survey. **Physical Review Letters**, v. 129, n. 11, p. 111101, Sept. 2022.
- 2 CYBURT, H. *et al.* Constraining strong baryon-dark-matter interactions with primordial nucleosynthesis and cosmic rays. **Physical Review D**, v. 65, n. 12, p. 123503, 2022.

PG128

Análise da produção de PpIX a partir da aplicação de ALA oral em lesões de língua de rato Wistar

BUZZÁ, Hilde Harb¹; STRINGASCI, Mirian Denise¹; INADA, Natalia Mayumi¹; ARRUDA, Semira Silva de¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

semira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A papilomatose respiratória de laringe é causada por infecção do papilomavírus humano (HPV, do termo inglês Human Papilomavírus) na região orocervical resultando em sintomas como rouquidão e dificuldade respiratória. A extração cirúrgica das lesões tem sido o tratamento padrão, apresentando uma taxa de recidiva com mais de 30%, apresentando uma necessidade necessitando de novas alternativas terapêuticas (XIMENES FILHO *et al.*, 2003). (3) A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma técnica cada vez mais difundido e com protocolos bem estabelecidos para o tratamento de câncer de pele não melanoma. Esta utiliza luz, uma substância fotossensibilizadora e oxigênio para induzir a morte em células que possuem um metabolismo alterado (HANDERSON; DOUGHERTY, 1992). (2) Este é um estudo pré-clínico utilizando modelo de lesões induzidas quimicamente em língua de rato para simular condições aspectos do tecido semelhantes a lesões de condilomas de orofaringe. A lesões foram induzidas com aplicação tópica da solução de 4-nitroquilonine n-oxide (4NQO) em propilenoglicol (BARCESSAT *et al.*, 2014) e o protocolo foi estabelecido com um 3 aplicações semanais por 5 e uma semana de intervalo para o experimento. (1) Nestas condições foi possível obter lesões permanentes sem edema aparente. A partir desse protocolo, o modelo foi utilizado para compreender o comportamento da produção e acúmulo de fotossensibilizador protoporfirina IX (PpIX) em tecidos com e sem lesões durante um período de 7 horas. Foram testadas diferentes soluções do pró-fármaco ácido aminulevulinico (ALA), aplicadas diretamente na lesão ou sistemicamente. A análise dos espectros de fluorescência permitiu identificar picos de acúmulo do fotossensibilizador nas línguas dos animais. Os grupos sem lesão mostraram comportamento similar para as diferentes formas de entrega do pró-fármaco. Nos grupos de animais com lesões, as curvas de acúmulo da PpIX se mostram diferentes para as distintas aplicações do pró-fármaco, sendo que o grupo que recebeu a solução diretamente na lesão mostrou uma produção menor de PpIX comparada à entrega sistêmica. Apesar desses dados, é necessário realizar a análise das imagens de campo amplo, onde poderemos também avaliar se existe seletividade da produção da PpIX nas regiões de lesões.

Palavras-chave: Human papillomavirus. Protoporfirina IX. 4NQO.

Agência de fomento: CAPES (8887.686643.2022-00)

Referências:

1 BARCESSAT, A. R. R. *et al.* Systemic toxic effects during early phases of topical 4-NQO-induced oral carcinogenesis in rats. **Journal of Oral Pathology & Medicine**, v. 43, n. 10, p. 770-777, 2014.

2 HANDERSON, B. W.; DOUGHERTY, T. J. How does photodynamic work? **Photochemistry and Photobiology**, v. 55, n. 1, p. 145-157, 1992.

3 XIMENES FILHO, J. A. *et al.* Papilomatose laríngea recorrente: experiência de 10 anos. **Revista Brasileira de Otorrinolaringologia**, v. 69, p. 599-604, 2003.

PG129

A dependência temporal da descoerência de um qubit por ruído de fase: cálculos analíticos das soluções exata e da equação mestra

NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹; MOTTA, Octávio da¹

octavioemotta@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Abordaremos o ruído de fase através do modelo de spin e bóson, com uma densidade espectral do banho bosônico ôhmica. (1) O cálculo da descoerência de um qubit de memória foi feito analiticamente para obtermos a solução exata do sistema global, incluindo o qubit e o banho, através da resolução da equação de Schrödinger. Também foi feito o cálculo analítico da solução da equação mestra não markoviana. A realização destes cálculos indicam que estas respostas são idênticas. Pretendemos encontrar a resposta para a razão da coincidência e entender se é ou não possível obter a proteção contra o ruído para um qubit de memória no contexto do procedimento de desacoplamento dinâmico contínuo no limite em que o ruído se torna markoviano.

Palavras-chave: Descoerência. Informação. Ruído.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 CALDEIRA, A. O.; LEGGETT, A. J. Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems. **Physical Review Letters**, v. 46, n. 4, p. 211, Jan. 1981.

PG130

Caracterização óptica e bioquímica da melanina – estudo comparando a melanina sintética e biológica

GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹; SOUZA, Giancarlo de¹; KURACHI, Cristina¹

giancarlo.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Melanina é um termo utilizado para denominar uma série de pigmentos naturais encontrados em uma abrangente gama de organismos. A principal função conhecida da melanina é a fotoproteção devido a sua alta capacidade de absorção e espalhamento de luz visível. (1-2) Além disso, o desenvolvimento de novas aplicações em moléculas estruturalmente parecidas com a melanina aumentou o interesse no entendimento da estrutura desse tipo de aglomerados. Neste contexto, o entendimento dos mecanismos envolvidos no processo de formação de aglomerados de melanina é de fundamental importância para a implementação das novas aplicações supracitadas. (3) Portanto, esse trabalho visa realizar a caracterização óptica, definição de características únicas e comparação entre melaninas produzidas sinteticamente, por células de mamíferos e por fungos. Experimentos de microscopia confocal com excitação por dois fótons (acrônimo do inglês para Two photon excitation - TPE) em 800nm foram conduzidos em células de melanoma murino (B16F10), *Rhizopus oryzae* e melanina sintética a fim de analisar a emissão de fluorescência estacionária em função da forma de produção da melanina. Partículas de melanina extraídas de células e diluídas em NaOH foram caracterizadas por microscopia confocal de transmissão e microscopia de fluorescência TPE. Essas duas técnicas em conjunto forneceram informação necessária para estimar o tamanho das partículas de melanina. Os menores particulados mediram entre 0,5µm a 1,2µm. O fungo *Rhizopus oryzae* também foi caracterizado e apresentou larga banda emissão de fluorescência. Além disso, melanina medida em diferentes regiões de células B16F10 (intra ou extracelular) foram separadamente analisadas e mostraram uma diferença média de 10% no intervalo de comprimento de onda entre 650nm e 700nm na fluorescência espectral adquirida por TPE. A melanina extracelular apresentou um sinal de fluorescência menos disperso e com menor intensidade nesse intervalo de comprimento de onda, quando comparado com a melanina interna.

Palavras-chave: Melanina. Fluorescência por dois fótons. Microscopia.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 KAXIRAS, E. *et al.* Structural model of eumelanin. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 21, p. 218102, Nov. 2006.
- 2 HUANG, Y. *et al.* Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry**, v. 394, n. 2, p. 239-250, Jan. 2013.
- 3 CALDAS, M. *et al.* Melanin nanoparticles as a promising tool for biomedical applications - a review.

Acta Biomaterialia, v. 105, p. 26-43, Mar. 2020. DOI: 10.1016/j.actbio.2020.01.044.

PG131

Development of a nanopolarizer based on plasmonic structures in Er³⁺-doped tellurite glasses

CALDERÓN, Gaston Lozano¹; RIVERA, Víctor Anthony García²; MESSADDEQ, Younès²; MAREGA JUNIOR, Euclides¹

glozano@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Centre d'Optique, Photonique et Laser, Université Laval, Canada

The polarization state is a fundamental property of light, and its manipulation exhibits important applications in transmitting information on optical technologies. The development of polarization controllers on the nanoscale with noble materials has attracted the attention of researchers in the last decades. In this scenario, plasmonic structures in thin metals exhibit remarkable properties such as the generation of surface plasmon polaritons (SPPs) and extraordinary optical transmission (EOT), which is a consequence of the SPP-light coupling and can be used for polarization controlling. For instance, the bull's eye nanostructures give rise to beaming with a focusing property on the subwavelength regime. (1) They can be implemented for linear polarization selection modifying the geometry of the aperture. In this research, different plasmonic bull's eye structures were fabricated in gold films on Er³⁺-doped tellurite glass for linear polarization manipulation at 1.5 μm . All nanostructures exhibit an elliptical aperture, which filters parallel electric field components to their major axis. Here, the Er³⁺ is excited under 980 nm and emits at 1.5 μm . Such wavelength is used in optical communications. Afterwards, the emitted light interacts with the plasmonic structure, where light and SPP couple and generate EOT through the aperture. This EOT is polarized parallel to the minor axis of the aperture. A linear polarizer is at the entrance of a photodetector, and the collected signal obeys Malu's law of polarization varying the polarizer angle. Therefore, the system acts as a nano-polarizer and can be implemented for photonic and signal-processing applications.

Palavras-chave: Bull's eye. Plasmonics. Tellurite glass.

Agência de fomento: FAPESP (2020/04835-3)

Referências:

1 CARRETERO-PALACIOS, S. *et al.* Mechanisms for extraordinary optical transmission through bull's eye structures. **Optics Express**, v. 19, n. 11, p. 10429-10442, 2011.

PG132

Bounding the effective Zeno dynamics on amplitude damping beyond the Zeno limit

ZAMBON, Guilherme Clarck¹; PINTO, Diogo de Oliveira Soares¹

guilhermezambon@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Developing protocols for preserving information in quantum systems is a fundamental pursuit in realizing practical quantum computation. In this regard, the Quantum Zeno Effect has emerged as a widely utilized technique to safeguard classical information stored in quantum systems. (1) However, existing results pertaining to this method often assume operations performed infinitely quickly on the system of interest, which only serves as an approximation to real-world scenarios, where the temporal resolution of any experimental apparatus is inherently finite. (2) In this study, we go beyond this conventional assumption and derive the effective Zeno dynamics for any time interval between operations. Our analysis considers a qubit undergoing thermalization, as described by a generalized amplitude damping channel, while the operations performed consist of projections onto an orthonormal basis that may or may not coincide with the pointer basis to which the system is thermalizing. By obtaining the probability of successfully storing a bit of information after a given time, we investigate the performance of the protocol in two important scenarios: the limit of many interventions, with a first-order correction to the Zeno limit, and the limit of very few interventions. In doing so, we provide valuable insights into the protocol's performance by establishing bounds on its efficacy. These findings enhance our understanding of the practical applicability of the Quantum Zeno Effect in preserving classical information stored in quantum systems, allowing for better design and optimization of quantum information processing protocols.

Palavras-chave: Quantum computation. Quantum information. Quantum Zeno effect.

Agência de fomento: FAPESP (2022/00993-9)

Referências:

- 1 ITANO, W. M. *et al.* Quantum zeno effect. **Physical Review A**, v. 41, n. 5, p. 2295, Mar. 1990.
- 2 BURGARTH, D. *et al.* Quantum Zeno dynamics from general quantum operations. **Quantum**, v. 4, p. 289, 2020.

PG133

Transistores orgânicos por efeito de campo com camadas dielétricas orgânica e inorgânica

CAPUZZO, Luiza Batista¹; SOUSA, Marcos da Silva¹; MIRANDA, Paulo Barbeitas¹

marcos.silva_sousa@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os transistores orgânicos por efeito de campo (OFETs) desempenham um papel fundamental na eletrônica orgânica, assim como os transistores convencionais desempenham na eletrônica. A camada dielétrica é um componente crucial desses dispositivos, e suas características têm um impacto significativo na eficiência dos OFETs. Por exemplo, a escolha das características dessa camada afeta diretamente a corrente de fuga de porta e a tensão de operação dos dispositivos. Portanto, a compreensão dos eventos físicos e químicos que ocorrem na camada dielétrica é essencial para o aprimoramento dos OFETs. Neste estudo, comparamos transistores a base do polímero semiconductor poli(3-hexiltiofeno) (P3HT) com dielétricos orgânico (PMMA) e inorgânico (AlOx). Nosso objetivo foi analisar as características elétricas de cada tipo, fornecendo informações relevantes para trabalhos futuros. Os resultados mostraram que os transistores com AlOx operam com tensões aplicadas da ordem de 5V, sendo adequados para aplicações de baixa tensão, enquanto os transistores com dielétrico orgânico requerem tensões de operação mais elevadas (80V). Essa diferença é atribuída ao valor da constante dielétrica de cada material (entre 7,5 e 15 para AlO e 3 para o PMMA, assim como à espessura e condutividade das camadas dielétricas. (1-2) Embora os dielétricos orgânicos polares, como o PMMA, exijam alta tensão de operação, eles são cientificamente interessantes devido à orientação dos grupos polares em resposta ao campo elétrico aplicado. Esse alinhamento molecular pode ser utilizado para mapear o campo elétrico (e consequentemente a distribuição de cargas) ao longo do canal de OFETs. Como trabalho futuro, a espectroscopia por geração de soma de frequências (espectroscopia SFG) será utilizada para investigar o alinhamento dos grupos polares e, consequentemente, o campo elétrico no dielétrico, sem danificar o dispositivo ou alterar a distribuição de cargas sondada. (3) Portanto, tanto os transistores com dielétrico inorgânico quanto os com dielétrico orgânico têm aplicações promissoras na ciência e tecnologia, justificando a quantidade significativa de pesquisas dedicadas a eles.

Palavras-chave: OFETs. Dieletricos. SFG.

Agência de fomento: CAPES (88887.506483/2020-00)

Referências:

1 KALTENBRUNNER, M. *et al.* Anodized aluminum oxide thin films for room-temperature-processed, flexible, low-voltage organic non-volatile memory elements with excellent charge retention. **Advanced Materials**, v. 23, n. 42, p. 4892-4896, 2011.

2 BRANDRUP, J. *et al.* **Polymer handbook**. New York: Wiley, 1999.

3 LAMBERT, A. G.; DAVIES, P. B.; NEIVANDT, D. J. Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: a tutorial review. **Applied Spectroscopy Reviews**, v. 40, n. 2, p. 103-145, 2005.

PG134

Um framework para desenvolvimento de sistemas integrados móveis e web para aplicações científicas em inteligência artificial

BRUNO, Odemir Martinez¹; RIBAS, Lucas Correia²; FURTADO, Emanuel Ferreira¹

emanuelferreirafurtado@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP; ²Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - UNESP

Este projeto de pesquisa tem como principal objetivo desenvolver um framework para aplicações científicas de inteligência artificial (IA). O framework consiste em uma coleção integrada de componentes que colaboram para produzir uma arquitetura reutilizável dado uma categoria de aplicativos relacionados. (1) Nos últimos anos, a área de IA experimentou um crescimento explosivo, à medida que se concentrou na criação de dispositivos capazes de exibir comportamentos identificados como inteligentes, impactando significativamente o campo e impulsionando a inovação tecnológica. (2) Entretanto, a disseminação e compartilhamento de modelos de IA desenvolvidos representam um desafio significativo no campo, dada a complexidade em tornar esses modelos acessíveis e utilizáveis pela comunidade científica e pela sociedade em geral. Nesse contexto, almeja-se desenvolver um framework inovador que permita aos pesquisadores da área de IA desenvolverem suas aplicações científicas de forma ágil e intuitiva, ao mesmo tempo em que promovem a difusão e compartilhamento dos resultados obtidos, ampliando o impacto e a acessibilidade das pesquisas realizadas. Para alcançar este propósito, as Redes Neurais Artificiais (RNAs), modelos computacionais inspirados no funcionamento de neurônios biológicos, auxiliará no processo de capacitar o framework em identificar, catalogar, armazenar e reconhecer padrões, o que é fundamental para diversas aplicações, incluindo análise de dados e processamento de imagens. (3) Além disso, pretende-se criar uma interface que facilite a integração do usuário e maximize a usabilidade da aplicação desenvolvida. Para atingir os objetivos propostos, será realizada uma análise detalhada das melhores práticas de desenvolvimento, seleção de ferramentas adequadas e aplicação de técnicas de aprendizado de máquina. Será utilizado um servidor para conduzir simulações e testes para garantir a eficácia e usabilidade do framework. Espera-se que este projeto contribua significativamente para o avanço da pesquisa e inovação em aplicações científicas de IA. O desenvolvimento do framework permitirá que os pesquisadores tenham uma ferramenta poderosa e amigável para operar em diversas plataformas, facilitando e agilizando a produção de projetos e pesquisas. O framework resultante proporcionará uma nova abordagem para a criação de interfaces que integrem o usuário de forma eficiente à aplicação desenvolvida, isso permitirá a elaboração de projetos específicos em uma base comum. Além disso, o framework acelera a implantação na sociedade de soluções desenvolvidas na academia, promovendo o avanço da IA e suas aplicações práticas. Em resumo, este projeto busca criar um framework inovador para o desenvolvimento de sistemas integrados móveis e web, capaz de auxiliar em aplicações científicas que lidam com análise de dados e inteligência artificial. Pretende-se desenvolver uma solução versátil, acessível e eficiente, permitindo que pesquisadores e cientistas realizem suas atividades de forma ágil e maximizem o impacto de suas descobertas no campo da inteligência artificial.

Palavras-chave: Inteligência artificial. Redes neurais artificiais. Framework.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

- 1 RAGNARSSON, O. A. **Importance of design patterns and frameworks for software development**. Reykjavik: Reykjavik University, 2014.
- 2 COZMAN, F. G. O futuro da (pesquisa em) inteligência artificial: algumas direções. **Revista USP**, v. 124, p. 11-20, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.11606/issn.2316-9036.v0i124p11-20>. Acesso em 2 Dez. 2023.
- 3 RIBAS, L.C. **Aprendizado de representações e caracterização de redes complexas com aplicações em visão computacional**. 2021. Tese (Doutorado em Ciências de Computação e Matemática Computacional) - Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021. DOI: 10.11606/T.55.2021.tde-03032022-083354.

PG135

Estudo do mecanismo de secagem de diferentes formulações de argamassas utilizadas na construção civil por RMNBONAGAMBA, Tito José¹; MARASSI, Agide Gimenez¹; PEREIRA, Luis Augusto¹

lap_scp@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No ramo da engenharia civil, muitos materiais são de grande utilidade a depender da aplicação desejada, tais como rigidez, forma e propriedade físico-química da estrutura. Dentre uma variedade de materiais, a presente pesquisa tem como objetivo o estudo do material conhecido como argamassa, um produto constituído de cimento e aditivos químicos que quando adicionado à água se torna uma pasta viscosa e aderente. No emprego desta substância, é utilizado o termo *Open Time* (OT), referente ao tempo disponível que o material possui decorrido desde o seu preparo até sua aplicação para que haja uma boa adesão. (1) O OT é influenciado diretamente pelos mecanismos de secagem e hidratação característicos da argamassa, no entanto, o comportamento de tais mecanismos não são completamente entendidos, sendo uma questão em aberto nesta área de pesquisa. (1) É conhecido que é possível controlar o OT através da adição de compostos químicos na formulação da argamassa, um composto utilizado atualmente é o *methylhydroxyethylcellulose* (HMEC), cuja a adição de pequenas concentrações já alteram significativamente os tempos de hidratação e secagem. (1-2) O principal interesse aqui em questão é estudar a influência do HMEC em diferentes formulações e concentrações, através de técnicas de Relaxometria e imagens por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) aplicada aos núcleos de átomos de hidrogênio (¹H) presentes nas amostras. O uso de técnicas de RMN para estudo de materiais aplicados à engenharia civil tem se tornado de grande popularidade devido ao seu caráter não invasivo, permitindo acompanhar a evolução dos materiais sem interferências no sistema. (3)

Palavras-chave: Ressonância Magnética Nuclear. Relaxometria. HMEC.**Agência de fomento:** Sem auxílio**Referências:**

- 1 FAIYAS, A. P. A. *et al.* Effect of MHEC on evaporation and hydration characteristics of glue mortar. **Cement and Concrete Research**, v. 83, p. 97-103, 2016.
- 2 FAIYAS, A. P. A. *et al.* How methylhydroxyethylcellulose (MHEC) influences drying in porous media. **Chemical Engineering Science**, v. 123, p. 620-628, 2015.
- 3 NAGEL, S. M.; STRANGFELD, C.; KRUSCHWITZ, S. Application of ¹H proton NMR relaxometry to building materials-a review. **Journal of Magnetic Resonance Open**, v. 6, p. 100012, 2021.

PG136

Estudos estruturais, biofísicos e bioquímicos de CAZymes com potencial na degradação de exopolissacarídeos de biofilmes microbianos

FREITAS, Amanda¹; ARAÚJO, Evandro Ares de²; POLIKARPOV, Igor¹

amandafreitas@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) - Campinas

A resistência microbiana aos antibióticos tem se tornado um dos principais riscos à saúde pública mundial. Tendo em consideração apenas a resistência antimicrobiana, estima-se que até 700 mil mortes podem ocorrer anualmente, e caso essa situação não seja controlada, este número pode aumentar para mais de 10 milhões por ano até 2050 e um custo econômico global estimado em 100 trilhões de dólares. (1) Infecções hospitalares já são um problema grave de saúde pública, gerando milhares de mortes diárias e tendo como consequência, os constantes aumentos nos custos dos tratamentos médicos avaliados atualmente em \$33 bilhões nos Estados Unidos e €13 a €24 bilhões na União Europeia por ano. Um modo natural da obtenção de resistência antimicrobiana por certas espécies de bactérias é a formação de biofilmes. Biofilmes são estruturas complexas que agregam células microbianas dentro de uma matriz extracelular composta majoritariamente por exopolissacarídeos (EPS), DNA extracelular e proteínas, onde os EPS compõem a principal fração em cerca de 85%. (2) Como estes EPS são de grande importância para a formação e manutenção do biofilmes, enzimas ativas em carboidratos complexos serão utilizadas para a degradação do biofilme bacteriano. Em especial, serão usadas glicosil hidrolases (GHs), que agem principalmente na despolimerização de polissacarídeos, das famílias GH9 e GH48 que atuam como celulases. (3) No contexto deste trabalho, propomos conduzir estudos de enzimas ativas em carboidratos complexos com potencial na degradação e prevenção da formação dos biofilmes bacterianos utilizando técnicas biofísicas, estruturais e de enzimologia molecular.

Palavras-chave: Biofilme. Celulases. Antimicrobiano.

Agência de fomento: CAPES (88887.821561/2023-00)

Referências:

- 1 O'NEILL, C. **Tackling drug-resistant infections globally**: final report and recommendations. United Kingdom: Review on Antimicrobial Resistance, May 2016.
- 2 ALGBURI, A. *et al.* Control of biofilm formation: antibiotics and beyond. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 83, n. 3, p. e02508-16, Jan. 2017.
- 3 FLEMING, D. *et al.* Glycoside hydrolases degrade polymicrobial bacterial biofilms in wounds. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 61, n. 2, p. e01998-16, Feb. 2017.

PG137

Chiral Majorana edge states in topological superconductors

MENEZES, José Carlos Egues de¹; PENTEADO, Poliana Heiffig¹; FRANCO-DIAZ, Erwin Renzo¹

erfrancodiaz@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Topological insulators are novel phases of matter characterized by the existence of gapless edge (2D) or surface (3D) states. Similarly, topological superconductors are predicted to host Majorana zero modes that could be used for topological quantum computing. (1) In this work, we consider a quantum anomalous Hall state (QAH) in proximity with an s-wave superconductor first studied by Qi *et al.* (2) By analyzing its bulk energy bands as a function of the model parameters, we construct the phase diagram of the system and show the existence of a topological superconducting phase that hosts chiral Majorana edge states via the bulk-edge correspondence. This is further corroborated by the numerical study of the system on a strip geometry.

Palavras-chave: Majorana fermions. Topological superconductors. Chiral edge states.

Agência de fomento: CAPES (PROEX 88887.705456/2022-00)

Referências:

- 1 QI, X. L.; ZHANG, S. C. Topological insulators and superconductors. **Reviews of Modern Physics**, v. 83, n. 4, p. 1057, 2011. DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1057.
- 2 QI, X. L.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S. C. Chiral topological superconductor from the quantum Hall state. **Physical Review B**, v. 82, n. 18, p. 184516, Nov. 2010. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.184516.

PG138

Células solares orgânicas: estudo de estabilidade e degradação em uso contínuo

FLOREZ, Yosthyn Ariza¹; FARIA, Roberto Mendonça¹; FARIA, Gregório Couto¹

ymariza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As células solares orgânicas (OSC) são dispositivos baseados em pequenas moléculas ou polímeros conjugados, capazes de transformar energia luminosa em corrente elétrica. (1) Esses dispositivos têm atraído a atenção da comunidade científica devido ao baixo custo de fabricação, compatibilidade com eletrônicos flexíveis e eficiências que se aproximam das do silício semicristalino. Apesar das altas eficiências das OSCs, há uma falta de estudos científicos que investiguem os processos de degradação em uso contínuo e em condições ambientes. O primeiro passo rumo à padronização nos testes de confiabilidade/estabilidade das OSCs foi dado em 2011 durante o Intentional Summer on Organic Photovoltaic Stability (ISOS), onde diretrizes e protocolos de teste foram estabelecidos. (2) No entanto, os protocolos do ISOS ainda não são completamente seguidos pela comunidade de OSCs, tornando os dados de degradação em fotovoltaicos difíceis de serem comparados e replicados. Portanto, este trabalho tem como foco desenvolver uma instrumentação a fim de estudar a estabilidade e os fenômenos de degradação em operação contínua dos dispositivos fotovoltaicos em condições do exterior, seguindo os protocolos do ISOS. Para isso, foram utilizadas camadas ativas produzidas a partir de uma mistura de polímero de P3HT - poli(3-hexiltiofeno) - com PC61BM - ácido [6,6]-fenil-C61-butírico -, com área de 0,045 cm² e a estrutura convencional ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/Ca/Al, que é uma estrutura bem conhecida de células solares orgânicas de heterojunção em massa (BHJ). A caracterização foi realizada utilizando um simulador solar classe AAA da ThermoOriel e uma fonte e medidor 238 da Keithley. Medidas de corrente e tensão (J-V) sob iluminação (100 mW/cm²) foram obtidas, permitindo extrair características e parâmetros das OSCs. Os dispositivos novos apresentaram um valor médio de densidade de corrente de curto-circuito (JSC) de 10 mA/cm², tensão de circuito aberto (VOC) de 0,62 V, fator de preenchimento (FF) de 51% e eficiência de conversão de energia (PCE) de 3%. Com o intuito de monitorar a degradação em operações contínuas, um sistema foi desenvolvido, utilizando Arduinos, relés e sensores de temperatura, irradiância e umidade relativa nas condições ambientes. Seguindo o protocolo de teste ISOS-O-2 aqui, o dispositivo é exposto ao ar atmosférico, sem encapsulamento adicional. (2) Os resultados indicaram que o dispositivo manteve 80% de sua eficiência de conversão de energia (PCE) (T80) após 20 horas de operação contínua, enquanto a densidade de corrente de curto-circuito (JSC) e o fator de preenchimento (FF) caíram para 80% de seus valores iniciais somente após 30 e 60 horas de operação, respectivamente. Além disso, a tensão de circuito aberto (VOC) permaneceu constante durante todo o teste. Reafirma-se que o oxigênio é um dos principais fatores que influenciam a degradação de um dispositivo fotovoltaico, e são discutidas diretrizes para melhorar a vida útil das OSCs em operação contínua.

Palavras-chave: Solar cells. ISOS protocols. Estabilidade.

Agência de fomento: CNPq (380849/2023-2)

Referências:

- 1 DOUMON, N. Y. **The degradation of organic solar cells:** from chemistry to device physics through materials. Groningen: University of Groningen, 2019.
- 2 REESE, M. O. *et al.* Consensus stability testing protocols for organic photovoltaic materials and devices. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, v. 95, n. 5, p. 1253-1267, May 2011.

PG139

Dynamic of vortex in a dipolar BEC bubble

BERETA, Sálvio Jacob¹; SANTARELLI, Mônica Andrioli Caracanhas¹

salviojacobbereta@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In this project is presented a semi-analytical solution to the density profile of a Bose-Einstein condensate (BEC) with dipolar interaction in a quasi-2D shell potential. This solution will allow us to determine each term that compose the system total energy, and will help to understand the cloud collapse. There theoretical models for purely 2D shell where the cloud does not collapse even for high dipole interaction. (1) However, we verified numerically that for quasi 2D shell the BEC dipolar cloud can collapse when the ratio of the dipolar interaction and the contact interaction parameters are order of 1. The dipolar energy increases with the density, our numerical simulations presents that for higher number of particles and confinement this ratio is smaller to collapse the cloud. We intend to apply our ansatz to determine these critical parameter values. With our analytical solution for the stationary dipolar BEC, it is possible to solve the dynamics of the vortices in the shell through the time-dependent Lagrangia formalism, using the results obtained by the author and already published. (2)

Palavras-chave: Bose-Einstein condensate. Bubble trap. Dipole interaction.

Agência de fomento: CAPES (88887.505539/2020-00)

Referências:

1 DINIZ, P. C. *et al.* Ground state and collective excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap. **Scientific Reports**, v. 10, p. 4831-1-4831-10, 2020.

2 BERETA, S. J.; CARACANHAS, M. A.; FETTER, A. L. Vortex dynamics on a spherical film. **Physical Review A**, v. 103, n. 5, p. 053306-1-053306-9, May 2021.

PG140

Investigating optical non-linearities and triplet quantum yield in porphyrins-chalcone structures

FAUSTINO, Maria Amparo¹; VALVERDE, João Victor²; SILVA, Júlia Akiyama da²; DE BONI, Leonardo²; GARCIA, Rafael de Queiroz²

julia.akiyama@usp.br

¹Universidade de Aveiro - Portugal; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

Porphyrin's molecular structure confers the ability to efficiently generate singlet oxygen, which is the primary cytotoxic agent responsible for the elimination of cancer cells, and this efficiency is related to the formation of molecules at the triplet long lifetime excited state. (1) Organic molecules exhibiting nonlinear optical responses have key advantages because of their potentially increasing depth of light penetration in tissue. (2) In this work, to complement the triplet study, we report on the study of two-photon absorption (TPA) spectra of a series of tetraphenyl porphyrin with chalcone derivatives groups in its neutral and cationic forms. It was expected that the electronic nature of porphyrins leads to a significant change in two-photon absorption cross-sections due to different electron-accepting groups and symmetry changes, influencing the TPA magnitude with distinct chalcone derivatives, which is extremely important in applications such as fluorescent bioprobes. (3) As it is known, so far, in the literature a few works report measurements on TPA cross-sections in porphyrins molecules, which is known to be difficult because of the easy aggregation of those at low molar concentrations. Thus, to circumvent this problem, we have set up a technique based on monitoring the fluorescence induced by a two-photon absorption that can be used for solutions at very low concentrations, avoiding aggregation.

Palavras-chave: Porphyrins. Two photon absorption. Spectroscopy.

Agência de fomento: FAPESP (2022/07652-2)

Referências:

- 1 MOURA, N. M. M. *et al.* A new synthetic approach to benzoporphyrins and Kröhnke type porphyrin-2-ylpyridines. **Chemical Communications**, v. 48, n. 49, p. 6142-6144, June 2012.
- 2 SRIVATSAN A. *et al.* Porphyrin-based photosensitizers and the corresponding multifunctional nanoplatforms for cancer-imaging and phototherapy. **Journal of Porphyrins Phthalocyanines**, v. 19, n. 1-3, p. 109-134, 2015.
- 3 LADEIRA, B. M. F. *et al.* Cationic Pyrrolidine/Pyrroline-substituted porphyrins as efficient photosensitizers against E. coli. **Molecules**, v. 26, n. 2, p. 464-1-464-17, Jan. 2021.

PG141

Florestas bipartidas semi-supervisionadas para predição de interações

CERRI, Ricardo¹; ILÍDIO, Pedro²; ALVES, André Hallwas Ribeiro¹; THIEMANN, Otavio Henrique²

ilidio@alumni.usp.br

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

Diversas tarefas de aprendizado de máquina podem ser formuladas como a predição de interações entre pares de entidades, muitas vezes representando relações entre objetos de duas classes distintas. Exemplos de tais tarefas são abundantes na biologia molecular computacional e incluem a predição de interações entre proteínas, entre proteínas e fármacos, entre proteínas e RNAs longos não codificantes (lncRNA) e entre microRNAs e RNAs mensageiros. O presente trabalho visa estudar e aprimorar algoritmos de aprendizado especificamente voltados a resolver esse tipo de problema, propondo modificações que melhorem tanto sua performance de predição como sua complexidade computacional. Aspectos complicantes dos problemas de predição de interações são as altas dimensionalidade e esparsidade dos rótulos disponíveis, que se originam natureza quadrática do número de possíveis pares em relação ao número de entidades de cada tipo. Como consequência, uma parcela pequena das possíveis interações são experimentalmente verificadas e compõem o conjunto de dados de treinamento, e a maioria das interações são desconhecidas. Tal cenário, por vezes denotado *positive-unlabeled learning*, coloca nuances na forma como o treinamento dos modelos é realizado e sugere que abordagens semi-supervisionadas, em que agrupamentos de entidades compõem o processo de treinamento, podem apresentar vantagens conforme o número de interações desconhecidas aumenta. (1) Assim, propomos algoritmos baseados em árvores de decisão semi-supervisionadas que operam diretamente sobre redes bipartidas, e os comparamos com modelos já bem estabelecidos na literatura. Mostramos desempenho de predição competitivo com o estado-da-arte em diferentes tarefas de predição de interações, e ganhos no tempo de treinamento são demonstrados para as adaptações de algoritmo desenvolvidas em relação aos modelos originais. Espera-se que as ideias discutidas e ferramentas disponibilizadas possam fomentar o estudo das árvores bipartidas e permitir que dados cada vez mais volumosos sejam levados integralmente em consideração.

Palavras-chave: Aprendizado de máquina. Predição de interações. Árvores de decisão.

Agência de fomento: CAPES (88887.529627/2020-00; 88887.641930/2021-00; 88887.684441/2022-00)

Referências:

1 BEKKER, J.; DAVIS, J. Learning from positive and unlabeled data: a survey. **Machine Learning**, v. 109, n. 4, p. 719-760, Apr. 2020.

PG142

Descontaminação de rim suíno para transplante com radiação ultravioleta-c e técnicas acopladas

GOENAGA, Loraine¹; FILHO, Jose Dirceu Vollet¹; INADA, Natalia¹; KURACHI, Cristina¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

lgoenagamafud@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho é a continuação de uma série de estudos que buscam demonstrar a viabilidade do uso de técnicas fotônicas acopladas a máquinas de suporte de órgãos durante o transplante renal para evitar a contaminação do doador para o receptor. Atualmente, existe um grande número de órgãos que são deixados para serem transplantados em decorrência da infecção por esses patógenos. (1) O transplante renal é atualmente uma atividade que melhora a qualidade de vida em pacientes com insuficiência renal irreversível (doença renal crônica), que se tornou um problema de saúde pública mundial. (2) Somado a isso, a Associação Brasileira de Transplante de Órgãos aponta que São Paulo é a cidade com mais pacientes em fila de espera para doação de rins, com um total de 14.330 pessoas (3), dados que agregam importância à pesquisa. A expectativa do estudo é eliminar ou reduzir a carga bacteriana do líquido refundido pelo órgão e dos resíduos bacterianos que permanecem em seu tecido, garantindo o sucesso da descontaminação. A radiação ultravioleta C (UV-C) foi utilizada com a combinação de ultrassom (US) e/ou adição do detergente Tween 80% ou Ps80% no fluido de perfusão do órgão para descontaminar o fluido de perfusão circulante do rim *ex-vivo* para transplante durante 4 horas de perfusão. A técnica UV-C pode reduzir 100% da carga microbiana na solução de preservação em menos de 2 h de irradiação durante a perfusão do órgão, enquanto que após a aplicação do US a mesma carga bacteriana inicial é recuperada nos tecidos renais perfundidos. Experimentos preliminares com Ps80% no fluido de preservação durante a perfusão possivelmente mostram mais liberação bacteriana após a maceração do órgão. Possíveis melhorias no processo de descontaminação circulante de rins suínos em solução de preservação de HTK por irradiação de UV-C em combinação com Ps80% são destacadas e o US neste estudo não teve sucesso na remoção de microorganismos. Por outro lado, UV-C continua sendo uma excelente técnica para descontaminação de *S. aureus* no líquido.

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

Agência de fomento: CNPq (140824/2021-9)

Referências:

1 HERNÁNDEZ, D. *et al.* Mortalidad en lista de espera para trasplante renal. **Nefrología**, v. 35, n. 1, p. 18-27, 2015. DOI: 10.3265/Nefrologia.pre2014.Oct.12681.

2 BRITO, E. V. S. *et al.* O significado, as vivências e perspectivas de pacientes submetidos ao transplante renal. **Revista Eletrônica Acervo Saúde**, v. supl. 17, n. 17, p. e223-1-e223-8, 2019. DOI:

10.25248/reas.e223.2019.

3 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE TRANSPLANTE DE ÓRGÃOS. **Dados numéricos da doação de órgãos e transplantes realizados por estado e instituição no período: janeiro/março - 2022.** Registro Brasileiro de Transplantes, ano XXVIII, n. 1. Disponível em: <https://site.abto.org.br/publicacao/xxviii-no1/>. Acesso em: 20 jul. 2022.

PG143

Clonagem e expressão da quinase plasmodial CLK3

OLIVEIRA, Gabriela¹; GODOY, Andre Schutzer de¹; GUIDO, Rafael Victório Carvalho¹

gabrielaslvvr@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A malária é uma doença infecciosa causada por protozoários do gênero *Plasmodium ssp.*. Apesar do sucesso significativo do combate à doença nas duas últimas décadas, em 2020 houve uma estimativa de 241 milhões de casos e 627000 óbitos devido à malária. O surgimento de parasitos resistentes aos antimaláricos padrões contribui para a persistência desses quadros endêmicos. Dessa forma, é de extrema importância a descoberta de compostos potentes e com mecanismos de ação inovadores. Para isso, a estratégia de modulação das vias de sinalização mediada por proteínas quinases tem sido explorada para inibir o desenvolvimento do parasito e combater a infecção. (1) A proteína quinase 3 ciclina-dependente (CLK3) é um alvo validado, sendo essencial para múltiplos estágios do parasito *P. falciparum*, incluindo o estágio sanguíneo, hepático e sexual. Essa enzima catalisa reações de fosforilação de proteínas ricas em serina-arginina, responsáveis na regulação de splicing alternativos impactando no processamento pós-traducional do RNA do parasito. Nesse sentido, selecionamos a quinase CLK3 para a elucidação estrutural e a descoberta de inibidores como candidatos a compostos líderes para a malária. (2) Assim, o objetivo central deste trabalho é o estudo estrutural de um alvo validado e a análise da relação entre estrutura e atividade de compostos para a descoberta de novos inibidores de classes moleculares diversas. Para isso, foi realizado o estudo da estrutura e função enzimática através dos relatos na literatura e dos bancos de dados *PlasmoDB*, *AlphaFoldDB* e *InterPro*. A partir disso, selecionamos duas partes da sequência do gene *Pf.CLK3* (PF3D71114700), uma referente a proteína inteira (CLK3) e outra somente do domínio catalítico (CLK3 truncada). Para isolar a sequência desses genes, foi realizado o cultivo in vitro da cepa sensível 3D7 do parasito *P. falciparum* e purificado seu RNA total para a confecção de uma biblioteca de cDNA do estágio de trofozoítos. Em seguida, utilizando a técnica de biologia molecular Reação em Cadeia da Polimerase (PCR), foram isolados e clonados os genes CLK3 e CLK3-truncada em vetores para a expressão em *E. coli* (pET-M11/LIC e pET-Trx/LIC, ambas com a Histag) e em *S. cerevisiae* (pBTEV, que possui a enzima GFP fusionada no C-terminal). Posteriormente, foram realizados diversos testes de expressão com as cepas bacterianas BL21, Rosetta 2, Rosetta Gami Plyss. A análise da expressão foi feita pela identificação das bandas proteicas em gel de poliacrilamida e análise com *Western Blot*, utilizando anticorpos Anti-His, mostrando a inexistência de expressão de ambas as proteínas nesse sistema heterólogo. Consecutivamente, foi realizado o teste de expressão em *S. cerevisiae*, selecionando 24 colônias positivas, analisando a expressão por meio do sinal de fluorescência da GFP. Nesse último teste, foram identificadas colônias cuja expressão heteróloga mostrou-se promissora. A partir disso, será estudada a otimização da expressão proteica, para em seguida realizar a purificação, cristalização, resolução da estrutura e estudos computacionais para encontrar possíveis inibidores dessa quinase.

Palavras-chave: CLK3. Biologia molecular. *Plasmodium falciparum*.**Agência de fomento:** CAPES (88887.719605/2022-00)

Referências:

- 1 ARENDSE, L. B. *et al.* *Plasmodium*.kinases as potential drug targets for Malaria: challenges and opportunities. **ACS Infectious Diseases**, v. 7, n. 3, p. 518-534, 2021.
- 2 ALAM, M. M. *et al.* Validation of the protein kinase PfCLK3 as a multistage cross-species malarial drug target. **Science**, v. 365, n. 6456, p. eaau1682-1-eaau1682-8, 2019.

PG144

Seleção de bactérias isoladas de um reservatório de petróleo brasileiro para a produção de biossurfactante: análises de inversão de molhabilidade em meio poroso e caracterização do biossurfactante semipurificado

FERREIRA, Jakeline de Freitas¹; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini¹

jakeline.ferreira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os biossurfactantes (BS) são compostos produzidos por microorganismos que possuem propriedades surfactantes, permitindo que se distribuam eficazmente na interface óleo/água e reduzam as tensões superficiais e interfaciais. (1) Sua aplicabilidade é vasta em diversos setores, na indústria de petróleo, esses compostos podem ser particularmente úteis em processos de recuperação terciária de petróleo, também conhecidos como MEOR. (2) Este trabalho teve como objetivo avaliar as frações de um biossurfactante semipurificado produzido pela linhagem bacteriana identificada como *Bacillus alveayuensis*.Ar35D5, utilizando sacarose e ureia como fontes de carbono e nitrogênio. O foco do estudo era determinar qual fração desse biossurfactante semipurificado demonstraria maior potencial para ser empregado em processos de MEOR. Para isso, utilizou-se o teste de inversão de molhabilidade de rocha carbonática e posteriormente se procedeu com a caracterização do tipo de biossurfactante identificado. *Bacillus alveayuensis*.foi cultivado em Meio Mineral com sacarose e ureia (C/N: 2/1), a 55°C, por 144 horas. As células bacterianas foram então removidas por centrifugação e o sobrenadante acidificado com HCl (5N) a pH 2,0 e armazenado overnight a 4°C. Os precipitados recolhidos foram reajustados para pH 7,0 e liofilizados para obtenção do BS-Bruto. Este passou por uma extração com clorofórmio, sendo em seguida seco e purificado parcialmente em uma coluna de sílica gel. Para isso, amostras de 0,1% do BS-Extraído foram dissolvidas em água ultrapurificada, adicionadas à coluna e eluídas com acetonitrila em gradientes crescentes de 25%, 45%, 60%, 75% e 100%. As frações obtidas foram liofilizadas resultando no produto final, o BS-Semipurificado. Amostras do BS-Semipurificado (25%, 45%, 60% e 75%) foram avaliadas através do teste de inversão de molhabilidade de rocha carbonática, conforme o método de Washburn (3), com o uso de um tensiômetro (Sigma 701 – OneAttension). O procedimento envolveu a adição de 0,2 g de rocha carbonática molhável a óleo a um cilindro de vidro com fundo poroso, que foi em seguida imerso nas soluções contendo 0,1% das respectivas frações de biossurfactante em teste. O aparelho registrou a quantidade de solução absorvida pelo cilindro por capilaridade ao longo de 30 minutos. Para fins de controle, utilizou-se o surfactante químico Tergitol (Sigma) na concentração de 0,1% e 100 ppm como controle positivo, e água destilada para o controle negativo. Posteriormente, a identificação do tipo de biossurfactante foi realizada por espectrometria de massas (Maldi-TOF), usando a surfactina (Sigma) como referência para comparação dos picos espectrométricos. Os resultados obtidos das amostras de BS-semipurificado indicaram que a fração de 60% (BS-Semi60%) exibiu a maior capacidade de alterar a molhabilidade do carbonato tratado com óleo, superando as demais frações testadas e o controle positivo do surfactante Tergitol a 0,01%. A análise espectrométrica da fração BS-Semi60% revelou a presença de um biossurfactante do tipo lipopeptídeo, apresentando picos característicos de iturina e surfactina. Tais descobertas evidenciam que a fração BS-Semi60% possui potencial promissor para aplicação em

processos de recuperação terciária de petróleo (MEOR).

Palavras-chave: Biosurfactante. Bacillus. MEOR.

Agência de fomento: CNPq (142282/2017-0)

Referências:

- 1 NITSCHKE, M.; PASTORE, G.M. Production and properties of a surfactant obtained from *Bacillus subtilis*. grown on cassava wastewater. **Bioresource Technology**, v. 97, n. 2, p. 336-341, Jan. 2006.
- 2 GEETHA S.J.; IBRAHIM M. B., SANKET J. J. Biosurfactants: Production and potential applications in microbial enhanced oil recovery (MEOR). **Biocatalysis and Agricultural Biotechnology**, v. 14, p. 23-32, Apr. 2018.
- 3 AUVINEN, H. **Powder wettability measurements.** Disponível em: <https://content.biolinscientific.com/powder-wettability?hsCtaTracking=0bb18092-6202-4b71-88b5-c0132306e8ca%7C9c826180-02d1-4715-8bb4-65190c24122>. Acesso em: 26 jun. 2023.

PG145

High on/off ratio on PEDOT:PSS-based OECT

TORRES, Bruno Bassi Millan¹; LUGINIESKI, Marcos¹; FARIA, Gregório Couto¹

mluginieski@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

One of the most common polymers used as active material in organic electrochemical transistors (OECTs) is the PEDOT:PSS. This happens due to his high conductivity and stability in water. Being a depletion mode material, the transistor's current is controlled by the de-doping of the PEDOT:PSS channel, with ions from the electrolyte layer. That is, the device is initially in the on state and it is turned off by the diffusion of cations from the electrolyte. A ratio between the on and off currents can be used to quantize the efficiency of the de-doping. This is the on/off ratio of the transistor, and it is an important parameter to be analyzed when thinking in sensing applications. Common on/off ratios for PEDOT:PSS-based OECTs with aqueous electrolytes are in the order of 10^2 . (1) Here, we achieved a high on/off ratio of 10^5 using an ionic gel as electrolyte layer. The gel consists of PVA as the polymer matrix and [BMIM][HSO₄] as the ionic liquid. This record on/off ratio indicates a good de-doping of the PSS chains, which leads to a very low off current in the order of 10^{-8} A. While needing a more deep understanding of the de-doping mechanism, it probably comes from two effects. One is the low energy barrier for ions, due to the small phase difference between the solid channel and the semi-solid electrolyte. The other is the low leakage current due to the more resistive electrolyte. The use of ionic gel in PEDOT:PSS-based OECTs are a novelty and can pave the way for devices with higher on/off ratios.

Palavras-chave: Organic Eletrochemical Transistors. On/off ratio. PEDOT:PSS.

Agência de fomento: FAPESP (2022/02768-2)

Referências:

1 FAN, J.; MONTEMAGNO, C.; GUPTA, M. 3D printed high transconductance organic electrochemical transistors on flexible substrates. **Organic Electronics**, v. 73, p. 122-129, Oct. 2019. DOI: 10.1016/j.orgel.2019.06.012.

PG146

Ativação da monooxigenase lítica de polissacarídeo de *Myceliophthora thermophila* utilizando fotossensibilizadores da terapia fotodinâmica

SEPULCHRO, Ana Gabriela Veiga¹; POLIKARPOV, Igor¹; DIAS, Lucas Danilo¹; VACILOTTO, Milena Moreira¹; PELLEGRINI, Vanessa de Oliveira Arnoldi¹; INADA, Natália Mayumi¹

milenamvacilotto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No contexto de sustentabilidade e uso consciente de matérias-primas, o aproveitamento de resíduos agro-industriais para obtenção de produtos de valor agregado tem sido um tópico de grande interesse nos últimos anos. Não obstante, a recalcitrância da biomassa se apresenta como o maior desafio para sua degradação, uma vez que limita o acesso de enzimas aos diferentes polímeros da parede celular vegetal. Nesse sentido, a descoberta de monooxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs) tem revolucionado o processo de despolimerização de biopolímeros como a celulose, hemicelulose e quitina, principalmente após a avaliação do papel da luz enquanto fonte de energia limpa e renovável como facilitador da decomposição da matéria vegetal. (1) Trabalhos recentes trouxeram clorofila, TiO₂, lignina e exoesqueleto de insetos como compostos capazes de utilizar essa energia provinda da luz para alimentar sistemas contendo LPMOs; atuando tanto como fonte de elétrons para redução do cobre catalítico da enzima, quanto na geração de peróxido de hidrogênio como co-substrato para promover a oxidação do substrato. (1-3) Não há relatos do uso de fotossensibilizadores, tipicamente empregados na terapia fotodinâmica (PDT), como alternativas para a composição de fotobiossistemas com LPMOs. O projeto em questão se propôs estudar a clivagem oxidativa de celulose amorfa utilizando a LPMO de *Myceliophthora thermophila* (MtLPMO9A) como modelo para a fotoativação de monooxigenases na presença de fotossensibilizadores/luz, com ênfase no azul de metileno (AM, fotossensibilizador Tipo I). Resultados revelaram que, na presença de luz, AM sozinho é suficiente para ativar a MtLPMO9A, tornando desnecessária a adição de um agente redutor externo como doador de elétrons (ex: ácido ascórbico). Observamos, também, que assim como nos demais fotobiossistemas discutidos na literatura, sistemas formados por AM/LPMO/luz produzem H₂O₂ in situ, o que é crucial para a atividade da LPMO. No entanto, a geração de peróxido induzida por luz se apresentou como uma faca de dois gumes: por um lado, quando em pequenas quantidades, aumenta a atividade catalítica da enzima, e por outro, seu excesso é acompanhado por inativação da LPMO devido a danos oxidativos em seu centro catalítico. Experimento com bissulfito de sódio, um consumidor químico de H₂O₂, enfatizaram essas conclusões ao resguardar a monooxigenase de efeitos deletérios causados por espécies reativas de oxigênio. Ademais, confirmamos o papel do radical superóxido, produzido no fotobiossistema PDT, como agente redutor de LPMOs. Por fim, comparamos a eficácia de fotossensibilizadores Tipo I e Tipo II na ativação da MtLPMO9A, e hipotetizamos que apenas os do Tipo I são capazes de alimentar os fotobiossistemas.

Palavras-chave: LPMO. H₂O₂. Fotossensibilizadores.

Agência de fomento: CAPES (88887.601517/2021-00)

Referências:

- 1 KOMMEDAL, E. G. *et al.* Visible light-exposed lignin facilitates cellulose solubilization by lytic polysaccharide monooxygenases. **Nature Communications**, v. 14, n. 1, p. 1063-1-1062-12, Feb. 2023.
- 2 BISSARO, B. *et al.* Controlled depolymerization of cellulose by light-driven lytic polysaccharide oxygenases. **Nature Communications**, v. 11, n. 1, 890-1-890-12, Feb. 2020.
- 3 KOMMEDAL, E. G. *et al.* Natural photoredox catalysts promote light-driven lytic polysaccharide monooxygenase reactions and enzymatic turnover of biomass. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 119, n. 34, p. e2204510119-1-e2204510119-8, Aug. 2022.

PG147

Aprisionamento óptico de sistemas biológicos para estudo da ação de agentes antimicrobianos em células individuais

SILVA, Larissa Reis Gomes da¹; MUNIZ, Sergio¹

lara.rgs@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A técnica do aprisionamento óptico permite manipular células procarióticas, eucarióticas e vírus de forma não invasiva, despertando grande interesse em estudos de biologia e física biomolecular. (1) Neste trabalho, usaremos um sistema de pinça óptica que emprega dois lasers: um laser infravermelho (980 nm) para aprisionar as partículas e um segundo laser de luz visível (532 nm) para detectar seu movimento. Uma lente objetiva de alta abertura numérica é empregada para concentrar a luz do primeiro laser na região de aprisionamento e coletar imagens e dados da região focal. A partir dessas informações, podemos realizar análises estatísticas do sinal para interpretar o movimento das partículas confinadas opticamente, o que permite criar quantificadores de interesse físico ou biológico. Por exemplo, ao aprisionar células bacterianas, buscamos identificar diferenças no padrão de movimento browniano causadas pelo movimento flagelar da célula, que é uma partícula ativa devido à sua fonte interna de energia (2), ao contrário de partículas passivas impulsionadas apenas por flutuações térmicas. Essa comparação é útil para determinar a vitalidade celular na presença de agentes antimicrobianos, permitindo estudos dinâmicos precisos sobre esses agentes (3) e também explorar informações físicas relacionadas à análise termodinâmica do movimento celular. (2)

Palavras-chave: Pinça óptica. Matéria ativa. Movimento browniano.

Agência de fomento: CAPES (8887.820478/2023-00)

Referências:

- 1 GRIER, D. G. A revolution in optical manipulation. **Nature**, v. 424, n. 6950, p. 810-816, 2003.
- 2 SPECK, T. Stochastic thermodynamics for active matter. **Euromphysics Letters**, v. 114, n. 3, p. 30006-p1-3006-p6, 2016.
- 3 SAMADI, A. *et al.* Evaluating the toxic effect of an antimicrobial agent on single bacterial cells with optical tweezers. **Biomedical Optics Express**, v. 6, n. 1, p. 112-117, 2015.

PG148

Estudo sobre os padrões espaço-temporais de autômatos celulares em redes complexas

JOAQUIM, Daniel Torkomian¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

danieltorkjoaquim@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Autômatos celulares e Redes Complexas são mecanismos e estratégias para o estudo dos chamados sistemas complexos, aqueles onde um grande número de agentes relativamente simples se organizam, sem a atuação de um comando central, em um todo coletivo que cria padrões, usa informações e em alguns casos pode até evoluir. (1) Enquanto o primeiro é definido como uma estrutura de grade, formada por componentes (células), que podem apresentar diferentes estados discretos, que variam ou não no tempo, esse dado por passos também discretos, de acordo com regras que dependem do próprio estado da célula em questão e dos estados das células dentro de uma vizinhança, o segundo pode ser definido como uma estrutura composta por um conjunto de nós (ou vértices) aos quais estão atrelados um conjunto de links (ou arestas). Seu grande potencial e abrangência não só os consolidaram como ferramentas desses sistemas como também revelaram sua importância, voltando a atenção para si mesmos de forma a tornarem-se objetos de investigação, por exemplo no caso das redes, da chamada ciência das redes. (2) Ainda, alguns autores têm proposto formas de atrelá-los e sua composição ganha notoriedade e enfoque. Caso dos Life-Like Network Automata (LLNA), método proposto para o reconhecimento de padrões em redes complexas, no qual a estrutura para evolução dos autômatos celulares ao invés de ser uma grade é uma rede complexa, cada célula é alocada em um nó da rede, e sua evolução, baseada nas regras do Jogo da Vida de Conway, produz padrões espaço-temporais que provêm as informações para a classificação das redes. (3) Esse trabalho visa investigar e aprofundar os conhecimentos a respeito desses padrões a partir das seguintes perguntas. Existe alguma ordenação das células, nós das redes, ideal ou facilitadora para identificação e distinção dos padrões de diferentes modelos de redes? A evolução desses autômatos e com isso os padrões são sensíveis aos estados iniciais impostos a cada célula? Como esses padrões respondem em casos de falhas e ataques às redes? Utilizando-se majoritariamente, até o momento, de uma base de redes sintéticas compostas de redes de Erdős-Rényi, mundo-pequeno e de Barabási-Albert, avaliou-se a ordenação por diferentes medidas estruturais e topológicas das redes, sendo a melhor por grau. Porém, uma vez que vários nós apresentam o mesmo grau, investigou-se o desempate desses nós de acordo com grau hierárquico, não resultando em diferenças significativas. Quanto aos estados iniciais, ou semente, os estudos desenvolvidos revelaram que os padrões podem ser sensíveis à posição de alocação do estado “um” em relação às características topológicas das redes, a depender do modelo dessas redes. Já nos estudos sobre falhas e ataques, os padrões mostraram-se mantenedores de sua estrutura geral, quando a semente é aleatória, para todos esses modelos de redes. Considera-se o aprofundamento desses estudos no que diz respeito à ordenação por características ou medidas que não estruturais ou topológicas, a avaliação da tarefa de classificação quando aplicadas as diferentes sementes, as quais determinados modelos mostraram-se sensíveis e a tarefa de classificação em redes com falhas ou ataques.

Palavras-chave: Autômatos celulares. Redes complexas. Reconhecimento de padrões.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 MITCHELL, M. **Complexity**: a guided tour. Oxford: Oxford University Press, 2009
- 2 BARABÁSI, A.-L. **Network science**. [20-]. Disponível em: <http://networksciencebook.com/>. Acesso em 19 jan. 2021.
- 3 MIRANDA, G. H. B.; MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Exploring spatio-temporal dynamics of cellular automata for pattern recognition in networks. **Science Reports**, v. 6, p. 37329-1-37329-15, Nov. 2016. DOI: doi.org/10.1038/srep37329.

PG149

Método de fitting de estruturas de bandas a partir de estratégias envolvendo propriedades de simetria para obtenção de parâmetros de Luttinger, Kane e g-factor

WANDERLEY, Adilson Barros¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹; OLIVEIRA, Caio Estevão de¹

adilson.wanderley@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Semicondutores são fundamentais na construção de células solares, computadores e celulares menores, mais rápidos, com maior capacidade de armazenamento, processamento e melhores baterias. Propriedades dos semicondutores são estudadas além de sua composição química, envolvendo a compreensão dos átomos que constituem seu arranjo cristalino. As propriedades físicas desses materiais são estudadas por meio de suas estruturas de bandas, que do ponto de vista teórico são descritas pelo Hamiltoniano da equação de Shrödinger, $H\psi = E\psi$. O método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ vem sendo utilizado há algumas décadas na construção de Hamiltonianos efetivos e fornecem uma descrição realística das estruturas de bandas com baixo custo computacional em relação aos métodos de primeiros princípios. (1-2) Esta abordagem permite ajuste de curvas sob dados experimentais para descrição dos *spin-splitting* e fatores-g efetivos (1-3) A construção desses Hamiltonianos utiliza propriedades de simetria do grupo cristalino que se pretende estudar a partir da teoria de grupos, no entanto, esse processo resulta na dependência de alguns parâmetros. (1,3) O Laboratório de Física Computacional do IFSC desenvolveu e utiliza, em parceria com o QTNano do IQSC, um método que extrai parâmetros por meio de *fitting* das estruturas de bandas previamente calculadas, utilizando o particionamento de Löwdin e termos de massa efetiva que vão além da ordem zero.(1,3) Para uma descrição envolvendo modelos com *gap* indireto (topo da banda de valência e fundo da banda condução não alinhados), ou mesmo quando o *gap* é da ordem do *spin-splitting*, e também quando se deseja estudar regiões mais distantes do ponto Γ na Zona de Brillouin (ZB), é necessário a inclusão de mais bandas, o que ainda mantém o custo computacional elevado. Uma maneira de abordar esse tipo de problema com soluções realísticas é, a partir das simetrias do sistema, utilizar os termos ímpares responsáveis por uma abertura mais significativa das energias, com a inclusão de vínculos que possibilitem descrever a simetria de inversão espacial no Hamiltoniano. Essa estratégia permite uma descrição mais realística, levando a uma melhora no *fitting* para determinar parâmetros como a massa efetiva, fatores-g, e parâmetros de Luttinger e Kane, com menor custo computacional e podendo ser futuramente integrada à abordagem conhecida por *High Throughput in Material Science*. Os *fittings* obtidos foram extremamente bons e se mantiveram bem ajustados em regiões mais distantes do ponto Γ na ZB, além de resultarem em parâmetros que estão em conformidade com os reportados na literatura para o GaAs na forma Zinblende.

Palavras-chave: Hamiltoniano efetivo. Método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. Parâmetros de Luttinger e Kane.

Agência de fomento: CNPq (140279/2020-2)

Referências:

- 1 BASTOS, C. M. O. *et al.* Stability and accuracy control of k-p parameters. **Semiconductor Science and Technology**, v. 31, n. 10, p. 105002-1-105002-10, Oct. 2016. DOI: 10.1088/0268-1242/31/10/105002.
- 2 MARQUARDT, O. *et al.* Multiband k-p model and fitting scheme for *ab initio*.based electronic structure parameters for wurtzite GaAs. **Physical Review B**, v. 101, p. 235147-1-235147-12, June 2020. DOI: 10.1103/PhysRevB.101.235147.
- 3 BASTOS, C. M. O. *et al.* A comprehensive study of g-factors, elastic, structural and electronic properties of III-V semiconductors using hybrid-density functional theory. **Journal of Applied Physics**, v. 123, n. 6, p. 065702-1-065702-13, Feb. 2018. DOI: 10.1063/1.5018325.

PG150

Estudo de propriedades de qubits em sistemas de baixa dimensionalidade

PAULI, Ian Giestas¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

iangiestas@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O domínio da computação quântica vem se mostrando como a próxima revolução tecnológica do nosso tempo. Apesar da teoria ser bem estabelecida e já existirem diversos algoritmos quânticos, existe um grande desafio para torná-los úteis de maneira geral, já que a construção de qubits estáveis em larga escala - com milhões de qubits, é muito sensível a temperatura e interações externas. Existem diferentes abordagens na construção de qubits como uso de fótons emaranhados, supercondutividade, átomos ou íons aprisionados e também através de materiais semicondutores. Os tamanhos usuais dos dispositivos semicondutores para produção de qubits aumentam a expectativa de que uma vez consolidados possam ser fabricados em escala e encapsulados em circuitos integrados, popularizando e barateando a tecnologia. Existem diversos sistemas semicondutores cujo estudo podem ser qubits viáveis e úteis para o desenvolvimento das tecnologias de computação não-clássicas. Entre os mais conhecidos, podem ser utilizados redes com impurezas doadoras de elétrons, que são ótimos qubits isolados, com excelentes tempos de coerência (1) e os Quantum Dots (QD) que são mais facilmente acopláveis e existe um certo domínio em sua fabricação. (2) No caso dos sistemas com impurezas não é fácil realizar o acoplamento de múltiplos qubits, além de ser necessário ter uma precisão quase atômica no posicionamento do dopante, o que dificulta sua construção. Em geral, os materiais utilizados para a construção de QD são junções de arsenetos do tipo III-V (GaAs, InAs, AlAs) cuja produção é feita através da epitaxia por feixe molecular, que possui uma baixa densidade de erros. Porém, devido as possíveis aplicações na computação quântica usando qubits baseados em spin, existe um crescente interesse em nanoestruturas de silício, que no entanto, possuem tamanhos menores (≈ 20 nm) que os QDs dos arsenetos, devido as massas efetivas serem maiores neste material e portanto são um desafio para sua fabricação. (3) Uma abordagem mista poderia usar os QD para mediar a interação entre as impurezas, facilitando a fabricação e seu acoplamento. Dessa forma, uma abordagem atomística, que em geral produz bons resultados, poderia ser utilizada porém tal abordagem não escala muito bem com o número de átomos. Assim, para tornar possível tratar sistemas mais realistas de engenharia usaremos o formalismo de massa efetiva, em que os resultados são satisfatórios contanto que as aproximações feitas sejam tais que levem em conta as interações mais importantes na descrição do sistema.

Palavras-chave: Física.

Agência de fomento: CAPES (8887.821568/2023-00)

Referências:

1 KANE, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. **Nature**, v. 393, p. 133-137, May 1998.

DOI: <https://doi.org/10.1038/30156>.

2 LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Quantum computation with quantum dots. **Physical Review A**, v. 57, n. 1, p. 120-126, Jan. 1998. DOI: 10.1103/PhysRevA.57.120.

3 CHATTERJEE, A. *et al.* Semiconductor qubits in practice. **Nature Reviews Physics**, v. 3, p. 157-177, Feb. 2021. DOI: 10.1038/s42254-021-00283-9.

PG151

Non-Markovian effects at the quantum speed limits

PINTO, Diogo de Oliveira Soares¹; SILVA, Alberto Jônatas Bezerra da¹

alberto.jonatas.bezerra@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work, we seek to understand the evolutive dynamics of general quantum systems. For that, the quantum system is described as an open quantum system, that is, a physical system that can interact with the environment. Such evolutive dynamics can be represented, in general (for both open and closed systems), with the formalism of quantum channels, i.e: we get a mapping of density operators onto density operators that describe the evolution of the system's state for every time " $t \geq 0$ ". Moreover, it's possible to get a description in terms of Master Equations, in which the evolution of the system is given in terms of a differential equation involving the density operator. As a result, such evolutions may have a "memory effect", where the state in a posterior time can depend on states from anterior times. These dynamics are called "Non-Markovian Dynamics". In general, dynamics of open quantum systems are usually non-Markovian. However, for a range of interesting physical systems, such memory effects can be neglected and the state in a time t does not depend on the states from anterior times $t' < t$. By this approximation, the dynamic of the system is called "Markovian Dynamic". Another important feature of evolutive dynamics of quantum systems is called Quantum Speed Limit. The Quantum Speed Limit (QSL) is the time lower bound for a given initial state to evolve to another state. Actually, recent results have shown that there is no general connection between the quantum speed limit and non-Markovianity. (1) Moreover, recent works also propose that non-Markovianity can be used to decrease the QSL between two quantum states. Therefore, the objective of this work is to understand how non-Markovian dynamics can affect the Quantum speed limit between two quantum states, which is an open problem yet, and also to understand how the divisibility of the Dynamical Map can affect the QSL.

Palavras-chave: Quantum information. Quantum speed limit. Non-Markovian quantum dynamics.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

1 TEITTINEN, J.; LYYRA, H.; MANISCALCO, S. There is no general connection between the quantum speed limit and non-Markovianity. **New Journal of Physics**, v. 21, p. 123041-1-123041-13, Dec. 2019.

PG152

Characterization of a Dimerized Indocyanine Green Nanoemulsion as a Photothermal Agent

JASINEVICIUS, Gabriel Oliveira¹; KWON, Nahyun²; MARTINELLI, Letícia Palombo¹; KASSAB, Giulia³; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; CHEN, Juan²; ZHENG, Gang²; BUZZÁ, Hilde Harb⁴; KURACHI, Cristina¹

gabriel.jasine@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²University of Toronto - U of T; ³University Health Network - UHN; ⁴Pontificia Universidad Catolica de Chile - UC

Photothermal therapy (PTT) has emerged as a promising non-invasive approach for cancer treatment, harnessing the conversion of light energy into heat to selectively destroy cancer cells while minimizing damage to healthy tissues. (1) However, the photostability limitations of light-absorbing agents like Indocyanine green (ICG) and other organic dyes present a significant obstacle to the effectiveness of PTT. (2) To address this challenge, this study explores the utilization of nanotechnology, specifically ICG as a surfactant in a nanoemulsion (Nano-dICG). Nano-dICG engineering promoted the formation of stable ICG dimers in the emulsion shell, resulting in enhanced photostability even during prolonged light exposure. (3) The characterization of Nano-dICG involved multiple techniques. High-performance liquid chromatography (HPLC) was employed to determine its chemical composition, purity, and molecular weight distribution. Transmission electron microscopy (TEM) provided detailed insights into the size, shape, and structural integrity of the Nano-dICG particles, allowing for morphological assessment. UV-Vis spectroscopy was employed to measure absorbance properties across various wavelengths, revealing the light absorption capabilities and spectral characteristics, including the formation of self-assembled J-aggregates. Fluorescence spectroscopy examined the emission of fluorescence signals, indicating a decrease in fluorescence compared to the monomeric counterpart. To evaluate the heat conversion and photostability properties of Nano-dICG, a laser (810 nm, 1 W/cm²) was utilized, and the heat production performance was assessed using a thermocouple and thermographic camera. These measurements facilitated the quantification and visualization of the photothermal conversion efficiency *in vitro*, which revealed a 2-fold increase in photothermal conversion efficiency and 4-fold slower rate of photodegradation compared to regular ICG. Phantom models demonstrated a substantial improvement in heat production following irradiation, reaching 129 °C for Nano-dICG and only 38°C for ICG. Furthermore, an *in vivo* experiment was conducted using Balb/c mice with 4T1 orthotopic tumors to compare the PTT efficiency of Nano-dICG with that of free ICG molecules and ICG-loaded liposomes. After the intravenous injection of the compounds and the start of the laser irradiation (825 nm, 0.65 W/cm²), heat production was monitored using a thermographic camera. The results of this experiment showed a 2-fold increase in heat production of Nano-dICG compared to regular ICG or liposome ICG. Overall, the development of Nano-dICG as a stable and efficient light-absorbing agent gives an important insight in overcoming the photostability limitations associated with monomeric cyanine dyes.

Palavras-chave: ICG Dimerization. Photothermal therapy. Photostability.

Agência de fomento: CNPq (140537/2022-8)

Referências:

1 WEN, Y.; SCHREIBER, C. L.; SMITH, B. D. Dual-targeted phototherapeutic agents as magic bullets for cancer. **Bioconjugate Chemistry**, v. 31, n. 3, p. 474-482, Jan. 2020. DOI: 10.1021/acs.bioconjchem.9b00836.

2 PELLE, G. D. *et al.* Cyanine dyes for photo-thermal therapy: a comparison of synthetic liposomes and natural erythrocyte-based carriers. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 22, n. 13, p. 6914-1-6914-16, July 2021.

3 KWON, N.; JASINEVICIUS, G. O.; KASSAB, G.; DING, L.; BU, J.; MARTINELLI, L. P.; FERREIRA, V. G.; DHALIWAL, A.; CHAN, H. H. L.; MO, Y.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.; CHEN, J.; ZHENG, G.; BUZZÁ, H. H. Nanostructure-driven indocyanine green dimerization generates ultra-stable phototheranostics nanoparticles. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 62, n. 28, p. e202305564-1- e202305564-11, July 2023. DOI: 10.1002/anie.202305564.

PG153

Nanopartículas de membrana e exossomos derivados de células tumorais para entrega de agentes imunomodulatórios

ZUCOLOTTO, Valtencir¹; QUITIBA, João Victor Brandão¹

jquitiba@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer é uma das doenças crônicas mais recorrentes na população brasileira e mundial. Neste cenário, o carcinoma hepatocelular está entre as neoplasias com maior número de mortes no mundo e a elevada frequência de casos de recidivas e metástases demandam o desenvolvimento de novas propostas terapêuticas para aumentar a atividade dos principais mecanismos efetores da imunidade celular. (1) Atualmente, a aplicação simultânea de diferentes quimioterápicos melhora a eficiência do tratamento dos pacientes. No entanto, a eficácia desses tratamentos ainda é limitada devido a vários problemas antigos, como a falta de especificidade das drogas, bem como sua baixa solubilidade, metabolismo e meia-vida. A nanomedicina é uma alternativa de grande potencial, tanto na terapia, quanto no diagnóstico antitumoral. Os materiais nanoengenhierados estão se tornando uma ferramenta complementar cada vez mais relevante para as técnicas imunoterapêuticas, apresentando resultados positivos e superando as dificuldades comuns aos tratamentos convencionais. (2) As nanopartículas biomiméticas para administração direcionada de drogas podem direcionar sua atividade para as células tumorais ou para células imunes, melhorar a biocompatibilidade e diminuir a imunogenicidade com toxicidade mínima. Como um dos principais fatores que favorece o crescimento e a expansão das células neoplásicas é sua capacidade de modular o microambiente tumoral e evadir-se da imunovigilância (1), o presente estudo visa desenvolver nanocarreadores para o transporte de agentes imunomoduladores para o interior de células tumorais, e para modulação das principais células do sistema imune. Com esse propósito, nanopartículas baseadas em exossomos e membranas plasmáticas, isoladas de células tumorais, serão funcionalizadas com sequências de siRNA, visando seu endereçamento para as células tumorais e a entrega de material antigênico a monócitos. Nossos resultados contribuem para o entendimento da aplicação de nanopartículas biomiméticas como nanocarreadores de agentes antineoplásicos e seus efeitos no câncer hepático, em células saudáveis e iniciando estudos para observar interações com células imunocompetentes.

Palavras-chave: Nanomedicina. Imunologia. Câncer.

Agência de fomento: CAPES (88887.684406/2022-00)

Referências:

1 CHIDAMBARANATHAN-REGHUPATY, S; FISHER, P. B.; SARKAR, D. Hepatocellular carcinoma (HCC): epidemiology, etiology and molecular classification. **Advances in Cancer Research**, v. 149, p. 1-61, 2021.

2 LI, J. *et al.* Precision design of engineered nanomaterials to guide immune systems for disease treatment. **Matter**, v. 5, n. 4, p. 1162-1191, 2022.

PG154

Structural characterization of *Magnaporthe oryzae* septins causing rice blast fungus

GARRATT, Richard Charles¹; ABBAS, Zaighum¹

agha1214@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septins are highly conserved proteins that are present in fungi and animals. They are essential for many cellular functions i.e., cell proliferation, phagocytosis, ciliogenesis, cell polarization and morphogenesis and others that require restructuring cytokinesis. (1) In the specific case of *M. oryzae*, septins play a critical role in the formation of a toroidal actin filament network at the base of the appressorium, enabling the penetration of the leaf surface. Research is needed to investigate the precise roles and contributions of septins 7 and 8 in the cellular processes and pathogenicity of *M. Oryzae*. The aim of this study is to structurally describe both the individual and collective *M. Oryzae* septins. The septins are isolated after being expressed in *E. coli*. Rosetta (DE3) and then analyzed for their stability, oligomerization, and nucleotide content. Crystallization and X-ray diffraction data collection are performed to resolve the structures, while negative contrast electron microscopy confirms complex organization. (2) Cryo-EM is employed for structural resolution of the complexes. We are currently able to express sep8-G for complex analysis while Sep-7 and Sep8-sumo and MBP is still unable to express. After purification of the sample by affinity chromatography (on a nickel column, the samples were purified by molecular exclusion chromatography (superdex200) and the chromatogram showed that Sep8-G in a volume that would correspond to the fact that they are forming Dimers. The denaturing SDS-PAGE gel showed that the septins are not being expressed equimolarly and modifications in conditions are also being made to improve stability and expression. Using the Gibson Assembly method (3) sub-clonings will be made to express the G domains of the septins: sep7G, sep8G and sep8GCDTM, these sub-clonings will be sequenced to confirm that the sequences are correct and to continue with the expression tests.

Palavras-chave: *Magnaporthe oryzae*. Crystallography. Electron Microscopy (EM).

Agência de fomento: CAPES (88887.801323/2023-00)

Referências:

- 1 VALADARES, N. F.; PEREIRA, H. M.; ARAÚJO, A. P. U.; GARRATT, R. C. Septin structure and filament assembly. **Biophysical Reviews**, v. 9, n. 5, p. 481-500, Oct. 2017. DOI: 10.1007/s12551-017-0320-4.
- 2 OSÉS-RUIZ, M. *et al.* Appressorium-mediated plant infection by *Magnaporthe oryzae* is regulated by a Pmk1-dependent hierarchical transcriptional network. **Nature Microbiology**, v. 6, n. 11, p. 1383-1397, 2021. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/s41564-021-00978-w>.
- 3 GIBSON, D. G. Enzymatic assembly of overlapping DNA fragments. *In*. VOIGT, C. (ed.) **Synthetic**

biology part B: computer aided design and DNA assembly. San Diego: Academic Press, 2011. cap. 15, p. 349-361. (Methods in Enzymology, v. 498). DOI: 10.1016/B978-0-12-385120-8.00015-2.

PG155

Caracterização funcional do complexo de replicação (DNA polimerase) do vírus Monkeypox, visando a busca por candidatos a fármacos antivirais

OLIVEIRA, Juliana Roberta Torini de Souza¹; OLIVA, Glaucius¹; SILVA, Bianca Righetti da¹

bianca.rsilva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Em maio de 2022, a Organização Mundial da Saúde (OMS) foi informada de um caso confirmado da varíola do macaco causada pelo vírus Monkeypox (MPXV) no Reino Unido, e após isto, houve uma rápida disseminação da doença em outros países. (1) O MPXV, pertence ao gênero Orthopoxvirus, família Poxviridae e apresenta DNA de fita dupla. (2) Esse vírus possui duas polimerases essenciais, uma DNA polimerase (DNApol) e uma RNA polimerase dependente de DNA (DdRp). A DNApol é um complexo catalítico que possui 3 subunidades proteicas, que juntas estabilizam a holoenzima, são elas, F8, A22 e E4. (3) Além disso, essa enzima é um importante alvo molecular, por ser essencial tanto na replicação viral quanto na síntese precoce no processo de infecção. Obter a DNA polimerase do vírus MPXV com suas 3 subunidades, com alto grau de rendimento e solubilidade, visando caracterizá-las funcionalmente através da padronização de ensaios cinéticos e estruturais. Os genes para expressão em *E.coli* das subunidades F8, A22 e E4 foram sintetizados comercialmente em vetores pET28a. Para expressão em células de inseto *S. frugiperda* (Sf9) foram desenhados primers para a subclonagem em diferentes vetores (pFastBac-6Hzb, pFastBac-Bse e pFastBac-CT10) visando analisar o melhor processo de purificação. Esses vetores permitem a expressão da proteína alvo fusionada à proteína 6Hzb; à uma cauda de histidinas no N-terminal e à uma cauda de histidinas no C terminal, respectivamente. Os vetores pET28a contendo o gene das subunidades F8, A22 e E4 foram ressuspendidos em água autoclavada na concentração de 50 ng/μl, 2 μl foram utilizados para transformar cepas de *E. coli* BL21, BL21 Star e Rosetta. Observou-se o aparecimento de colônias isoladas após 24 horas, que foram inoculadas em meio LB seletivo contendo 50 μg/mL de kanamicina. Os plasmídeos foram recuperados utilizando o Kit Fast-n-Easy Plasmid mini-prep e serão utilizados para amplificação e posterior subclonagem dos genes em vetores de expressão em células Sf9, caso seja necessário. As cepas transformadas serão submetidas à teste de expressão em pequena escala, variando o meio de expressão (LB – Luria Bertani, TB - Terrific Broth e ZYM - meio auto indutor) e a concentração de IPTG (0,25 mM, 0,5 mM e 1M). Após os testes de expressão, será possível avaliar rendimento e solubilidade das proteínas alvo, estabelecendo um protocolo otimizado de expressão e assim seguir para os testes de purificação e padronização dos ensaios cinéticos.

Palavras-chave: Monkeypox. DNA polimerase. Inibidores.

Agência de fomento: FAPESP (2023/04660-7)

Referências:

- 1 BOING, A. C. *et al.* Monkeypox: o que estamos esperando para agir? **Revista Brasileira de Epidemiologia**, v. 25, p. e220020-1e220020-3. DOI: 10.1590/1980-549720220020.2
- 2 CLARO, I. M. *et al.* Shotgun metagenomic sequencing of the first case of monkeypox virus in Brazil. **Revista do Instituto de Medicina Tropical de São Paulo**, v. 64, p. e48-1-48-4, 2022.
- 3 PENG, Q. *et al.* Structure of monkeypox virus DNA polymerase holoenzyme. **Science**, v. 379, n. 6627, p. 100-105, 2022.

PG156

Estudos de caracterização de microagulhas dissolvíveis com 10% de ácido aminolevulínico e sua aplicação em tumor animal

BEJAR, Dianeth Sara Lima¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; REQUENA, Michelle Barreto¹

dsara@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A terapia fotodinâmica (TFD) tópica aplicada para o tratamento de câncer de pele não melanoma tem recebido muita atenção devido à sua abordagem não invasiva e aos mínimos efeitos colaterais. O protocolo convencional consiste na aplicação de um creme para induzir o acúmulo de um fotossensibilizador (FS) endógeno, a protoporfirina IX (PpIX). Após a incubação do creme, é feita a aplicação de luz com comprimento de onda específico para gerar a formação de espécies reativas e eliminar as células cancerígenas. Para garantir a eficácia da TFD tópica, é importante assegurar que o FS atravessasse as camadas da pele e se distribua no tumor de forma homogênea. Neste contexto, uma opção para otimização é o uso de microagulhas dissolvíveis (MD), dispositivos minimamente invasivos de baixo custo e fácil fabricação, com potencial terapêutico para a entrega intradérmica de fármacos. Um modelo de MD contendo 5% de ácido aminolevulínico (ALA) e 20% do polímero Gantrez AN-139 foi previamente testado para TFD em estudos pré-clínicos, apresentando uma distribuição mais homogênea do FS comparada ao tratamento com creme com 5% de ALA. (1) No entanto, a prática clínica atual utiliza creme contendo 20% de precursor de PpIX. Por isso, o presente estudo avaliou a otimização da formulação deste modelo de microagulhas, buscando aumentar a concentração do ALA. Foram avaliados novos protocolos para alcançar a produção inédita de MD contendo 10% de ALA (PDT Pharma, Brasil). Para isto, foram testadas diferentes condições de temperatura e umidade. Adicionalmente, foram realizados testes *in vitro* para caracterização da resistência mecânica usando texturômetro (Texture Analyzer System, Stable Micro Systems, Surrey, Inglaterra) em modelo de parafilme. (2) As MDs produzidas foram suficientemente rígidas e com capacidade de inserção efetiva, apresentando poucos ou quase nenhum sinal de degradação. (3) Posteriormente, foram realizados estudos *in vivo* com aplicação em um modelo de tumor animal para análise da eficiência da produção de PpIX, comparando com a aplicação do creme contendo a mesma concentração de ALA. Foi feito o monitoramento utilizando espectroscopia de fluorescência (ex. 408 nm) e imagens de campo amplo de fluorescência (exc. 450 nm e 630 nm) para a análise da distribuição da PpIX. Atualmente estão em andamento os estudos complementares relacionados aos efeitos da TFD avaliados por histologia a partir de biópsias dos tumores tratados.

Palavras-chave: Microagulhas dissolvíveis. Ácido aminolevulínico. Terapia fotodinâmica.

Agência de fomento: CAPES (88887.703138/2022-00)

Referências:

- 1 REQUENA, M. B. *et al.* Dissolving microneedles containing aminolevulinic acid improves

protoporphyrin IX distribution. **Journal of Biophotonics**, v. 14, n. 1, p. e202000128-1-e202000128-14, Jan. 2021.

2 LARRAÑETA E. *et al.* A proposed model membrane and test method for microneedle insertion studies. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 472, n. 1-2, p. 65-73, Sept. 2014. DOI: 10.1016/J.IJPHARM.2014.05.042.

3 BEJAR, D. S. L.; REQUENA, M. B.; BAGNATO, V. S. Avaliação e otimização da formulação de microagulhas dissolvíveis para uso em terapia fotodinâmica. *In*. ENCONTRO DE INOVAÇÃO E TECNOLOGIAS APLICADAS À SAÚDE, 2023, São Carlos. **Livro de Resumos**[...]. São Carlos: Instituto de Física de São Carlos - IFSC, 2023. p. 14.

PG157

Análise multi-resolução inteligente: combinando a Transformada *Wavelet* com estratégias de *deep learning* para redução de ruídos em imagens de ressonância magnética

PAIVA, Fernando Fernandes¹; QUEIROZ, Guilherme Emmanuel Tagliaferro de¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco²

getqueiroz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Biociências - UNESP

A técnica de Imagens por Ressonância Magnética (IRM) é amplamente utilizada na área médica e em pesquisas por ser capaz de estudar objetos de interesse de forma segura e não invasiva. Nos últimos anos, houve avanços significativos na tecnologia dos scanners de IRM, melhorando a resolução espacial, a velocidade de aquisição e a relação sinal-ruído (SNR). No entanto, as imagens de ressonância magnética ainda apresentam problemas, como inomogeneidades de intensidade de sinal, ruído e artefatos, que podem degradar a qualidade das imagens obtidas. O sinal de IRM é intrinsecamente baixo, o que implica que a relação entre tempo de aquisição e qualidade da imagem é um aspecto crucial a ser considerado, principalmente em aplicações "*in vivo*". Aquisições mais curtas resultam inevitavelmente em imagens mais degradadas pelo ruído, dificultando a realização de análises adequadas, diagnósticos e interferindo em eventuais etapas de pós-processamento. O termo ruído aqui se refere estritamente ao ruído térmico, também conhecido como ruído de Johnson-Nyquist. (1) A supressão de ruído em imagens de RM é um problema significativo e tem sido extensivamente discutida na literatura recente. (2-3) Ao contrário do problema usual de supressão de ruído em imagens naturais, que se assume uma distribuição Gaussiana para o ruído, nas imagens de Ressonância Magnética (RM), o ruído geralmente segue distribuições distintas. Isso ocorre devido à dinâmica à qual o ruído é submetido no processo de reconstrução da imagem a partir dos dados brutos de RM, o que torna a escolha de um método adequado de supressão de ruído consideravelmente mais complexa. Neste trabalho, exploramos inicialmente a utilização de métricas de qualidade de imagem (MQI) para comparar diferentes métodos tradicionais de supressão de ruído em imagens, adaptados para uso em IRM, e demonstramos que embora produzam resultados satisfatórios, exigem ajustes manuais de parâmetros e estimativas precisas das características estatísticas do ruído. Além disso, esses métodos apresentam limitações na capacidade de generalização e sua complexidade de uso acaba dificultando sua aplicação prática. Nos últimos anos, as técnicas de aprendizagem de máquina têm desempenhado um papel significativo em diversas áreas, incluindo a restauração de imagens. A supressão de ruído é um desafio particular nesse contexto, levando muitos pesquisadores a explorar o potencial dessas técnicas para desenvolver modelos de aprendizado capazes de converter imagens ruidosas em imagens livres de ruído. Essa abordagem surge como uma alternativa promissora aos métodos tradicionais. Diante desse cenário, colocamo-nos a investigar a hipótese de que a combinação de modelos de *deep learning* com análise multi-espectral, utilizando a Transformada *Wavelet*, é capaz de resultar em modelos de supressão de ruído mais robustos e aptos a lidar de forma efetiva com diferentes características estatísticas.

Palavras-chave: Imagens por ressonância magnética. Ruído. Aprendizagem profunda.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 ALHINAI, N. Introduction to biomedical signal processing and artificial intelligence. *In*. ZGALLAI, W. (ed.). **Biomedical signal processing and artificial intelligence in healthcare**. New York: Academic Press, 2020. Cap. 1. p. 1-28. (Developments in biomedical engineering and bioelectronics).
- 2 AJA-FERNÁNDEZ, S.; VEGAS-SÁNCHEZ-FERRERO, G. **Statistical analysis of noise in MRI: modeling, filtering and estimation**. Cham: Springer, 2018.
- 3 JAN, J. **Medical image processing, reconstruction and analysis**. 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2019.

PG158

Time evolution of a Bose-Einstein condensate of Na atoms under fast potential variation

CHACCA, Cosme Wilfredo Tancayllo¹; CASTILHO, Patricia Christina Marques¹; FARIAS, Kilvia Mayre¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; SALCEDO, Edward Gutenberg Iraitá¹; GASPAR, Pedro Minarelli¹

edwardiraita@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Traditionally Bose-Einstein condensate is an equilibrium state with a distribution of population between the ground state and the excited states of an external potential for particles. However, in some situations, modifications can take the system out of the traditional equilibrium. (1) Because the system can thermalize through interactions, returning to the equilibrium situation. The observation of such phenomena can be done through a sudden change in the potential. In this process an initial Hamiltonian defined as $H(a)$ has the system in an equilibrium state. Suddenly the Hamiltonian is changed to $H(b)$, and the system finds itself out of the situation of equilibrium of the new Hamiltonian. A time evolution that must occur promotes the system to a new state and the reaching of these new states corresponds to a transient regime. (2) Experimentally, this occurs when we produce abrupt changes in the potential that trap the atoms. In our laboratory, at the research center (CePOF) in São Carlos - Brazil, this quantum quench is performed for sodium atoms, by changing the frequency from 216 rad/sec to 700 rad/sec, followed by observing the system during different time intervals. The main result is that our system suffers a quench, producing evolution of the condensate fraction and also the temperature. Preliminary measurements indicate how fast the new equilibrium condition is reached.

Palavras-chave: Bose-Einstein condensate. Out of equilibrium.

Agência de fomento: CAPES (88887.803786/2023-00)

Referências:

1 ERNE, S. *et al.* Universal dynamics in an isolated one-dimensional Bose gas far from equilibrium. *Nature*, v. 563, p. 225–229, 2018. DOI: 10.1038/s41586-018-0667-0.

2 LIU, I. K. *et al.* Dynamical equilibration across a quenched phase transition in a trapped quantum gas. *Communications Physics*, v. 1, p. 24, 2018. DOI: 10.1038/s42005-018-0023-6.

PG159

Credulidade completa e erosão da confiança em um modelo de informação enganosa

FONTANARI, José Fernando¹; TÓRTURA, Henrique de Almeida¹

henrique.tortura@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Decisões de agentes são pautadas pela sua habilidade de compreender aspectos do meio em que estão inseridos e, como uma alternativa à investigação individual, podem contar com a informação social (1) fornecida por companheiros, seguindo um comportamento imitativo. Numa perspectiva de ação coletiva, o acesso a conhecimento que leva a decisões em prol do bem comum se traduz em segurança epistêmica (2), que pode ser posta em risco quando a informação espalhada não é fidedigna. Para investigar como informações enganosas podem ameaçar a segurança epistêmica numa população que conta com informação social, desenvolvemos um modelo evolucionário baseado em teoria de jogos, no qual indivíduos devem estimar uma propriedade de seu ambiente para gerar descendentes. Tal estimativa pode ser feita explorando o ambiente ou copiando, com possíveis distorções, aquela feita por um colega. Informações enganosas foram incorporadas como uma distorção que sempre tende a uma menor chance de sobrevivência, ou seja, uma estimativa mais imprecisa. O modelo possui uma solução analítica no caso de uma população homogênea, na qual todos os agentes têm a mesma probabilidade de cópia, um parâmetro que representa a credulidade. (3) Simulações em populações heterogêneas, quando os agentes têm diferentes probabilidades de cópia e esse comportamento é transmitido para seus descendentes, indicam uma convergência para uma credulidade que não necessariamente representa a melhor chance de sobrevivência no caso homogêneo. No entanto, existem indícios que populações heterogêneas geram situações iguais àsquelas encontradas em homogêneas: em um ambiente perigoso e com chance baixa o suficiente de copiar uma informação enganosa, a melhor estratégia se torna sempre copiar de outros indivíduos; enquanto em um ambiente de baixa periculosidade e alta distorção em informações transmitidas, a melhor estratégia é a apenas exploratória, não havendo mais compartilhamento de informação.

Palavras-chave: Informação enganosa. Segurança epistêmica. Informação social.

Agência de fomento: CAPES (88887.604113/2021-00)

Referências:

1 AGUIÑAGA, J.; GOMULKIEWICZ, R.; WATTS, H. E. Effect of social information on an individual's assessment of its environment. **Animal Behaviour**, v. 178, p. 267-277, Aug. 2021. DOI: 10.1016/j.anbehav.2021.06.009.

2 SEGER, E. *et al.*. **Tackling threats to informed decision-making in democratic societies: promoting epistemic security in a technologically-advanced world**. London: Alan Turing Institute, 2020.

109 p.

3 TÓRTURA, H. A.; FONTANARI, J. F. The synergy between two threats: disinformation and covid-19. **Mathematical Models and Methods in Applied Sciences**. 2022. DOI: 10.1142/S021820252250049X.

PG160

Controle de um Sistema para Imageamento Hiperespectral de Lesões de Pele

GARCIA, Marlon¹; PRATAVIEIRA, Sebastião²; VIEIRA, Bruno Freitas³

bruno.freitas.vieira@usp.br

¹Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” (Unesp); ²Instituto de Física de São Carlos - USP; ³Escola de Engenharia de São Carlos - USP

O imageamento hiperespectral tornou-se uma das principais técnicas para diagnóstico precoce de doenças por se tratar de um método não-invasivo e com sensibilidade de detecção da assinatura de diversos cromóforos e fluoróforos. (1) O método consiste em combinar as vantagens do imageamento com a espectroscopia, possibilitando expandir o domínio de análise para o tridimensional e permitir uma interpretação mais precisa e rápida em relação aos métodos convencionais. No caso de doenças de pele, estimar os padrões de cromóforos, como oxi e desoxiemoglobina, melanina e espessura da epiderme, são primordiais para o rastreamento. (2-3) No entanto, esses sistemas contêm uma elevada quantidade de dados, tornando a aquisição e processamento relativamente lento para certos tipos de aplicações. Porém, técnicas utilizando redes neurais já se mostram eficazes em reduzir o tempo de processamento, resultando em reduções de até 9000 vezes para estimar múltiplos parâmetros de pele. (3) O desenvolvimento de instrumentações cada vez mais rápidas também permite aplicações em tempo real, a depender da latência da instrumentação e do processamento da imagem. Assim, com uma instrumentação adequada e uma rede neural bem projetada é possível desenvolver um sistema capaz de estimar os mapas de diversos cromóforos em tempo real. Objetivou-se desenvolver um sistema capaz de coletar imagens hiperespectrais e estimar os principais cromóforos da pele, como oxi e desoxiemoglobina, melanina e espessura da epiderme em tempo real utilizando uma fonte luminosa na região do visível. Primeiramente, montou-se um sistema óptico composto por uma câmera monocromática, um filtro sintonizável de cristal líquido, uma lente objetiva e uma fonte luminosa circular. Em seguida, elaborou-se um algoritmo em LabView (Austin - TX, EUA) para realização das aquisições das imagens em uma varredura de comprimentos de onda predefinidos. Assim, com a instrumentação conectada a um computador, coletou-se imagens da mão de um voluntário saudável submetido a um experimento de oclusão, dividido nas etapas de repouso, oclusão e liberação. Posteriormente, realizou-se o processamento das imagens, utilizando as equações provenientes da Lei de Beer-Lambert e de considerações da concentração de oxi e desoxiemoglobina em pontos isosbéticos. (2) Processando-se as imagens adquiridas, foi possível constatar que o valor médio dos pixels, que é proporcional ao nível de saturação de oxigênio, de regiões vascularizadas é maior que o de regiões não-vascularizadas. Ademais, também foi possível se obter a dinâmica da saturação de oxigênio, com a depleção da intensidade dos pixels nas regiões vascularizadas durante a oclusão, e uma recomposição dos valores de intensidade dos pixels após a liberação da oclusão retornando aos valores do estado inicial de repouso. Assim, foi possível se construir um sistema de imageamento hiperespectral, e imagear regiões vascularizadas de voluntários saudáveis durante o experimento de oclusão. Também aplicou-se algoritmos de obtenção dos mapas de oxi e desoxiemoglobina, obtendo-se valores que corroboram com o experimento de oclusão. Espera-se, como próximos passos, obter os mapas de melanina e de espessura da epiderme, usando-se métodos semelhantes, e treinar algoritmos de redes

neurais para se obter baixa latência, adquirindo-se imagens hiperespectrais em tempos compatíveis com experimentos in-vivo em tempo real.

Palavras-chave: Sistema hiperespectral. Imageamento in-vivo. Mapa de hemoglobina.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 MANGOTRA, H. *et al.* Hyperspectral imaging for early diagnosis of diseases: a review. **Expert Systems**, p. e13311, 2023. DOI:10.1111/exsy.13311.
- 2 SHONAT, R. D. *et al.* Near-simultaneous hemoglobin saturation and oxygen tension maps in the mouse cortex during amphetamine stimulation. *In*. HUDETZ, A.G.; BRULEY, D.F. (ed.). **Oxygen transport to tissue XX**. Boston: Springer, 1998. p. 149-158. (Advances in experimental medicine and biology, v. 454).
- 3 GEVAUX, L. *et al.* Real-time skin chromophore estimation from hyperspectral images using a neural network. **Skin Research and Technology**, v. 27, n. 2, p. 163-177, 2021.

PG161

Septinas de *Magnaporthe oryzae*: uma abordagem estrutural

CAVINI, Italo Augusto¹; ARAUJO, Ana Paula Ulian de¹; FERNÁNDEZ, Luis Alberto Valverde¹; CIOL, Heloisa¹; PINTO, Andressa Patricia Alves¹; ABBAS, Zaighum¹; MENDONÇA, Deborah Cezar¹; GARRATT, Richard Charles¹

lvalverde7@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As septinas são ubíquas em fungos e animais e podem ser encontradas em diversos locais nas células e podem-se envolver em muitos processos importantes além da citocinese. (1) No fungo *Magnaporthe oryzae* que é o agente causador da brusone do arroz, uma rede de filamentos se forma na base do apressório por meio das septinas, que formam uma estrutura de anel dinâmica, que se localiza com a os filamentos de actina. (2) As septinas, fornecem a rigidez cortical e a curvatura da membrana necessárias para a protrusão de uma cavilha de penetração rígida para romper a superfície da folha. O objetivo deste trabalho é a caracterização estrutural das septinas de *M. oryzae*, individualmente e de seus complexos, tendo como objetivos expressar as proteínas em *E. coli*, purificar e caracterizar as septinas de forma estável e depois avaliar o grau de oligomerização, teor de nucleotídeo além de realizar ensaios de cristalização; coletar dados de difração de raios-x dos cristais obtidos para resolução das estruturas, realizar ensaios de microscopia electrónica por contrastação negativa para confirmar a organização dos complexos com as proteínas integrais e resolver a estrutura dos complexos por Crio-ME. Atualmente conseguimos expressar e avaliar o estado oligomérico através da técnica SEC-MALS do complexo sep5-sep6-sep3-sep4 (octâmero em NaCl2 300mM), sep5-sep6 (dímero em 300mM de NaCl2). No caso de sep7 a proteína não é muito estável, então trabalhamos só com o domínio GHLa0 o que resulto em um dímero. No caso de sep3-sep4 ainda não foi avaliado o estado oligomérico mas já foi purificado de forma estável. Depois de avaliar o estado oligomérico fizemos ensaios de cristalografia onde obtivemos cristais e microscopia electrónica por contrastação negativa onde os resultados da mostram que o complexo sep5-sep6-sep3-sep4 em NaCl2 50mM forma filamentos, e em NaCl2 300mM forma octâmeros e hexâmetros. Quando se fez microscopia electrónica por contrastação negativa de sep5-sep6 em NaCl2 150mM olhamos tetrameros, informação que vamos confirmar no SEC-MALS. Usando o método de Gibson Assembly (3) foram feitas subclonagens para expressar os domínios G das septinas: sep3G-sep4G, sep5G-sep6G, sep7G e sep8G e sep8GCDTM, essas subclonagens estão sendo sequenciadas para confirmar se as sequências estão corretas e continuar com os testes de expressão.

Palavras-chave: Septina. *Magnaporthe oryzae*. Biologia estrutural

Agência de fomento: FAPESP (2022/00152-4)

Referências:

1 VALADARES, N.F. *et al.* Septin structure and filament assembly. **Biophysical Reviews**, v. 9, n. 5, p. 481-500, 2017. DOI: 10.1007/s12551-017-0320-4.

2 OSÉS-RUIZ, M. *et al.* Appressorium-mediated plant infection by *Magnaporthe oryzae* is regulated by a Pmk1-dependent hierarchical transcriptional network. **Nature Microbiology**, v. 6, n. 11, p. 1383-1397, 2021. DOI: 10.1038/s41564-021-00978-w.

3 GIBSON, D. G. Enzymatic assembly of overlapping DNA fragments. **Methods in Enzymology**. 2011. DOI: 10.1016/B978-0-12-385120-8.00015-2.

PG162

Índice de melanina, índice de eritema e luminosidade da pele humana: dados experimentais e simulações de Monte Carlo

LIMA, Victor Porto Gontijo de^{1,2}; MORIYAMA, Lilian Tan¹

victorportog@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto Federal de Brasília - IFB

Na óptica biomédica, o conhecimento da cor da pele é fundamental para o desenvolvimento e a otimização de fototerapias, bem como é relevante para técnicas de fotodiagnóstico que podem auxiliar na detecção precoce e no monitoramento de doenças. Além disso, é crucial para o desenvolvimento de dispositivos e sensores ópticos utilizados em aplicações biomédicas. A cor da pele humana é determinada principalmente pela quantidade e distribuição de dois cromóforos: melanina e hemoglobina. Diretrizes para a medição da cor da pele (1) sugerem usar o índice de melanina (MI) e o índice de eritema (EI) para quantificar indiretamente melanina e hemoglobina in vivo. MI e EI são quantidades calculadas a partir da refletância difusa da pele em duas bandas específicas, 568 (no verde) e 655 nm (no vermelho). Mostramos previamente que utilizando o espectro de refletância da luz no intervalo de 380 a 700 nm, é possível calcular as coordenadas de cor da pele (no espaço de cores Lab.) assumindo um iluminante padrão e um observador padrão; em especial, mostramos que a luminosidade L diminui com o aumento das frações volumétricas de melanina e hemoglobina em simulações de Monte Carlo. (2) As simulações de Monte Carlo permitem explorar as inúmeras formas de interação da luz com tecidos biológicos e nas mais variadas condições. Diante disso, o presente estudo visou conduzir a investigação de uma relação matemática simples existente entre MI, EI e L , a partir do processamento de dados experimentais disponíveis em uma base de dados e de resultados de simulações de Monte Carlo. Primeiro, uma base de dados disponível publicamente com 4932 espectros de refletância da pele humana (3) obtidos em 9 distintas regiões anatômicas foi utilizada. Em seguida, simulações de Monte Carlo foram executadas com o simulador CUDAMCML assumindo um modelo simplificado de quatro camadas para o comportamento óptico da pele humana na região do braço e antebraço. As simulações cobriram o intervalo entre 380 e 700 nm para diferentes pares de frações volumétricas de melanina e de hemoglobina e variando outros parâmetros de entrada, como a razão de mistura das melaninas, a saturação do sangue, as espessuras das camadas e as curvas espectrais do coeficiente de espalhamento das camadas. Foram executadas 51.480 simulações, resultando em 792 amostras. As quantidades MI, EI e $\ln(L)$ apresentaram forte correlação tanto para os resultados do processamento dos dados experimentais quanto para os resultados das simulações. Essa possível relação existente entre MI, EI e L é particularmente interessante porque MI e EI são respectivos a apenas dois comprimentos de onda, 568 e 655 nm, enquanto a luminosidade L é respectiva a toda região espectral entre 380 e 700 nm. Esse resultado de que é possível obter a luminosidade L da pele humana de forma simples e a partir de dados de refletância em apenas dois comprimentos de onda abre caminhos para novas aplicações tecnológicas e clínicas, como, por exemplo, na personalização de dosimetria de luz para fototerapias, em técnicas de fotodiagnóstico e fabricação de próteses.

Palavras-chave: Propagação da luz na pele. Simulações de Monte Carlo. Colorimetria.

Agência de fomento: CAPES (88887.631088/2021-00)

Referências:

- 1 FULLERTON, A. *et al.* Guidelines for measurement of skin colour and erythema. **Contact Dermatitis**, v. 35, n. 1, p. 1-10, 1996.
- 2 LIMA, V. P. G.; MORIYAMA, L. T. Diversidade de cores da pele humana e simulações de Monte Carlo. *In.* ENCONTRO DE INOVAÇÃO E TECNOLOGIAS APLICADAS À SAÚDE, 1., 2023, São Carlos. **Resumos[...]** São Carlos: IFSC/USP, 2023. p. 53.
- 3 XIAO, K. *et al.* Improved method for skin reflectance reconstruction from camera images. **Optics Express**, v. 24, n. 13, p. 14934-14950, 2016.

PG163

Produção e manipulação de moléculas frias

FERNÁNDEZ, David Rodríguez¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹; TORRES, Manuel Lefran¹; CARDOSO, Marcos¹

davidrf@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Moléculas frias e ultrafrias se apresentam como uma nova revolução no campo da física atômica, molecular e óptica (AMO). Por terem uma estrutura energética mais complexa e um maior número de graus de liberdade em comparação com os átomos, seu controle quântico preciso pode abrir novos caminhos em áreas como testes de precisão da física fundamental, química fria, computação e informação quântica e física de matéria condensada. No entanto, essa mesma complexidade impossibilita a aplicação de dispositivos de resfriamento e desaceleração conhecidos da física atômica, tornando-as difíceis de controlar experimentalmente. Atualmente, o resfriamento a laser de apenas um conjunto muito restrito de espécies moleculares tem sido realizado. Recentemente, em nosso laboratório foi possível resfriar vibracionalmente um feixe supersônico de moléculas Rb_2 inicialmente distribuídas em vários níveis vibracionais, seguindo o esquema proposto pelos autores Torres M.A.L. e outros. (1) Este artigo apresenta as principais ideias de um novo projeto que visa melhorar o sistema de bombeamento óptico e modelagem espectral utilizado em nosso laboratório, para produzir uma amostra densa de moléculas Rb_2 aprisionadas em seu estado fundamental. Uma vez alcançado este objetivo, propomos o estudo de colisões bi-moleculares.

Palavras-chave: Moléculas frias. Bombeamento óptico. Modelagem espectral

Agência de fomento: FAPESP (2022/16904-5)

Referências:

1 TORRES, M. A. L. *et al.* Proposal for Zeeman slowing of Rb_2 molecules in a supersonic beam, inducing internal cooling. **Journal of Physics B**, v. 56, n. 6, p. 065301-1-065301-10, Mar. 2023.

PG164

Molecular dynamics simulations of drug interactions with cell membrane models

OLIVEIRA JUNIOR., Osvaldo Novais de¹; ZAPATA, Juan Carlos Burbano¹; MOURA, André Farias de²
juan.burbano@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Departamento de Química - UFSCar

Levofloxacin is a broad-spectrum antibiotic used to fight infections in the respiratory system, whose action in topical administration (via inhalation) depends on molecular-level interactions with the alveolar membrane. (1) Here, we investigate the interaction between levofloxacin and Langmuir monolayers mimicking the lung surfactant. The possible conformations and hydrophilicity of levofloxacin upon interacting with water were determined using optimized coarse-grained (CG) MARTINI forcefield parameters for the zwitterionic levofloxacin of bonded and nonbonded parameters. (2) The CG structure for levofloxacin was compatible with that obtained in atomistic simulations, yielding similar radii of gyration and octanol-water partition coefficient. The influence of levofloxacin on a Langmuir monolayer of hydrated dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC), one of the main components of lung surfactant, was studied with molecular dynamics (MD) simulations. Levofloxacin induces an increase in pressure for the phase transition in surface pressure-area isotherms, consistent with experimental results. (3) It also causes an increase in surface pressure and displacement to larger areas, with monolayer expansion and stability. Levofloxacin molecules are accumulated in the DPPC-water interface, being forced to the headgroup region upon compression as verified in the charge density and DPPC-levofloxacin energy distributions. The presence of levofloxacin has little effect on the DPPC-water interaction, i.e. it does not affect the total value of the Coulomb and LJ energies. These findings may provide insights into efficient ways for topical medication with this drug.

Palavras-chave: Levofloxacin. Langmuir DPPC monolayer model. Surface pressure-area isotherm.

Agência de fomento: CNPq (141000/2019-8)

Referências:

- 1 EZELARAB, H. A. A. *et al.* Recent updates of fluoroquinolones as antibacterial agents. **Archid der Pharmazie**, v. 351, n. 9, p. e1800141, 2018. DOI: 10.1002/ardp.201800141.
- 2 MARRINK, S. J.; DE VRIES, A. H.; MARK, A. E. Coarse grained model for semiquantitative lipid simulations. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 108, n. 2, p. 750–760, 2004. DOI: 10.1021/jp036508g.
- 3 ORTIZ-COLLAZOS, S. *et al.* Interaction of levofloxacin with lung surfactant at the air-water interface. **Colloids Surfaces B - biointerfaces**, v. 158, p. 689–696, 2017. DOI: 10.1016/j.colsurfb.2017.07.066.

PG165

Separation of iron and proton induced air showers using convolutional neural networks

VECCHI, Manuela¹; SOUZA, Vitor de²; GILER, Andres Gabriel Delgado²

andres.delgado@usp.br

¹University of Groningen; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

The Cherenkov Telescope Array (CTA) will be the next-generation gamma-ray observatory offering better flux sensitivity than the current generation. (1) Each telescope will detect the Cherenkov emission from air showers initiated by gamma and cosmic rays. State-of-the-art deep learning algorithms, such as convolutional neural networks (CNNs), are used to reconstruct the energy and classify the primary particle. (2-3) CNNs are commonly used for image classification because they extract and learn from the features and patterns within an image. In this work, we proposed an architecture to separate iron and proton induced showers using the image recorded in the camera (Img), the depth of the shower maximum (Xmax), and the particle energy (E) associated with the air shower. We tested the CNN performance with three different inputs: (i) Img + E, (ii) Img + Xmax, and (iii) Img + Xmax + E. In addition, we used reconstructed and true values (for the Xmax and E) during the training and the prediction. This architecture takes advantage of the image patterns and the air showers' mass-sensitive parameters. Therefore, we aim to obtain significant efficiency in identifying iron and proton events.

Palavras-chave: Cosmic rays. Cherenkov telescope. Artificial neural network.

Agência de fomento: CAPES (88887.370416/2019-00)

Referências:

- 1 ACHARYA, B. S. *et al.*. **Science with the Cherenkov telescope array**. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1709.07997.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2023.
- 2 NIETO, D. *et al.*. Reconstruction of IACT events using deep learning techniques with CTLearn. **Astronomical Society of the Pacific Conference Series**, v. 532, p. 191., July 2022. DOI: 10.48550/arXiv.2101.07626.
- 3 ASCHERSLEBEN, J. *et al.*. Application of pattern spectra and convolutional neural networks to the analysis of simulated Cherenkov Telescope Array Data. **International Cosmic Ray Conference**. March 2022. DOI: 10.22323/1.395.0697.

PG166

Caracterização e controle do perfil de dano anatômico e histológico da terapia sonodinâmica em modelo animal

PRATAVIEIRA, Sebastião¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; CARVALHO, Iago Silva e¹; ALVES, Fernanda¹

iagocarvalho0167@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer é uma doença altamente prevalente e com taxas de incidências em ascensão no mundo inteiro. Mortes e adoecimento por câncer devastam famílias e impedem o paciente de ter uma vida normal depois da descoberta. O tratamento por terapias convencionais foi importante, mas devido aos diferentes tipos de câncer e efeitos colaterais extremamente agressivos, terapias alternativas são necessárias para contornar os problemas, sendo tão eficientes quanto, ou até mais. As terapias dinâmicas são amplamente difundidas e algumas já utilizadas na oncologia, como a terapia fotodinâmica (TFD). (1) A terapia sonodinâmica (TSD) se apresenta como mais uma alternativa nesse espectro e possui muitas vantagens em relação à TFD, porém seu desenvolvimento está apenas no começo e uma melhor fundamentação é necessária. Visando a caracterização do perfil de dano histológico e anatômico proveniente da ação do ultrassom com e sem sensibilizador, assim como variando outros parâmetros, é possível determinar procedimentos operacionais padrão para a entrega de energia e sua relação com o alvo. Para isso, modelos animais serão utilizados para tratamento da TSD e a caracterização se dará em tecido hepático. Uma vez entendido como as ondas sonoras interagem com o tecido (distribuição espacial) e o dano causado, é possível avançar os estudos cujo alvo sejam células neoplásicas com o objetivo de desenvolver a TSD até sua aplicação clínica.

Palavras-chave: Sonodinâmica. Produção de ROS. Cavitação

Agência de fomento: FAPESP (2022/13224-3)

Referências:

1 PONCE AYALA, E. T. *et al.* Photodynamic and sonodynamic therapy with protoporphyrin IX: in vitro and in vivo studies. **Ultrasound in Medicine & Biology**, v. 47, n. 4, p. 1032-1044, 2021. DOI: 10.1016/j.ultrasmedbio.2020.12.006.

PG167

Centros nitrogênio-vacância como plataforma para estudo de flutuações quânticas

MUNIZ, Sergio Ricardo¹; ANDRADE, Lucas Nunes Sales de¹

lucas.nunes.andrade@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os centros de nitrogênio vacância (NV) em diamantes são sistemas de spin de estado sólido promissores para aplicações em computação quântica e processamento de informação quântica. Esses centros possuem um longo tempo de coerência em seu estado fundamental tripleto A^3 , podendo alcançar cerca de 1,8 ms. (1) Além disso, eles são facilmente manipuláveis e mensuráveis usando luz laser e micro-ondas, mesmo em temperatura ambiente. Essas características tornam os centros NV úteis para estudar propriedades fundamentais de termodinâmica quântica e investigar relações de flutuações quânticas. No contexto da termodinâmica estocástica, as relações de flutuações quânticas são relações exatas que descrevem fenômenos fora do equilíbrio. Em particular, nesse contexto, uma hipótese postula que a variação de energia (ΔE) em um sistema aberto, entre dois tempos distintos, segue uma relação de troca de flutuação. Para verificar essa relação, foi aplicado um protocolo experimental buscando obter a estatística das mudanças de energia nesse sistema. Neste trabalho, apresentamos medidas realizadas em um ensemble de centros NV, inspiradas em um estudo anterior (2) que verificou a relação mencionada utilizando centros NV isolados (single-NV).

Palavras-chave: Nitrogênio-vacância. Flutuações quânticas. Informação quântica.

Agência de fomento: CNPq (141453/2021-4)

Referências:

- 1 BALASUBRAMANIAN, G. *et al.* Ultralong spin coherence time in isotopically engineered diamond. **Nature Materials**, v.8, n.5, p.383-387, 2009.
- 2 HERNÁNDEZ-GÓMEZ, S. *et al.* Experimental test of exchange fluctuation relations in an open quantum system. **Physical Review Research**, v. 2, n. 2, p.023327, 2020.

PG168

Expressão recombinante de histonas de *Trypanosoma cruzi* para construção de nucleossomosISSA, Matheus¹; THIEMANN, Otavio¹

matheus.issa@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Doença de Chagas, causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, ainda afeta milhões de indivíduos em todo o mundo. Trata-se de uma enfermidade que persiste sem vacinas e sem opções adequadas de tratamento para sua fase crônica e a quimioterapia disponível para a fase aguda é dificultada pela limitada eficácia e efeitos colaterais graves. (1) Os processos pelos quais o parasita adquire infectividade e sobrevive em diferentes hospedeiros envolvem a regulação da expressão gênica, principalmente a nível pós-transcricional. No entanto, a estrutura/organização da cromatina dos tripanossomatídeos é semelhante a de outros eucariotos, incluindo variantes de histonas e modificações pós-traducionais. Evidências recentes sugerem que mecanismos epigenéticos desempenham um papel fundamental na biologia desses parasitas, apresentando uma abordagem promissora para o desenvolvimento direcionado de novos medicamentos. (2) Para desvendar o funcionamento desses mecanismos, torna-se essencial explorar a organização da cromatina, a estrutura atômica das histonas e de seu complexo, o nucleossomo. Sendo assim, o presente estudo visa investigar a estrutura das histonas, produzidas por meio de técnicas de expressão recombinante, bem como do próprio complexo, utilizando técnicas de Crio-Microscopia Eletrônica (do inglês, *Cryogenic Electron Microscopy*. Cryo-EM). Além disso, busca-se estudar as propriedades cinéticas e termodinâmicas que regem a montagem do nucleossomo e sua interação com o DNA. Para alcançar esses objetivos, tanto as histonas canônicas (H2A, H2B, H3 e H4) quanto as histonas variantes (H2A.Z, H2B.V, H3.V e H4.V) estão sendo expressas com o auxílio de construções de genes únicos, bem como de polistrônicos, de modo a superar instabilidades no enovelamento natural das proteínas. Os aspectos biofísicos da formação do complexo e sua interação com regiões específicas do genoma de *T. cruzi* estão sendo avaliados por meio de técnicas de anisotropia de fluorescência. Investigações estruturais serão conduzidas utilizando Cryo-EM, a fim de se obter o entendimento da organização e função dos nucleossomos em *T. cruzi*. Os resultados preliminares obtidos até o momento destacam a importância de estudos adicionais para construir o conhecimento necessário sobre a regulação gênica de *T. cruzi*, estabelecendo, assim, as bases para o desenvolvimento futuro de medicamentos e terapias inovadoras para o combate efetivo da Doença de Chagas.

Palavras-chave: Crio-microscopia eletrônica. Nucleossomo. *Trypanosoma cruzi*.**Agência de fomento:** CNPq (130990/2022-1)**Referências:**

1 PEREZ, C. J.; LYMBERY, A. J.; THOMPSON, R. C. A. Reactivation of Chagas disease: implications for global health. **Trends in Parasitology**, v. 31, n. 11, p. 595-603, 2015.

2 LIMA, A. R. J *et al.* Nucleosome landscape reflects phenotypic differences in *Trypanosoma cruzi*.life forms. **PLoS Pathogens**, v. 17, n. 1, p. e1009272, 2021.

PG169

Study of structural and dynamic properties in Li phosphate glasses by solid state NMR and impedance spectroscopySCHNEIDER, José Fábian¹; FERREIRA, Matheus José¹; MORGUETTO, Gabriel Felipe¹

gabriel.morguetto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

With the addition of a mobile ion species, ionic conductivity is introduced in a glass matrix, which makes these materials interesting for applications in batteries and sensors. However, when a second mobile ion species is added to the system, strong anomalies in the conductivity might be observed, reducing the values by orders of magnitude below the expected additive behavior. (1) This phenomenon is known as the mixed ion effect (MIE). The extent of the deviation is usually correlated with the size mismatch between the mixed ions, attaining several orders of magnitude for pairs such as Li-Na or Li-Rb. Other properties of the material dependent on ion diffusion also exhibit nonlinear behavior. A model that tries to explain the MIE is the Random Ion Distribution Model (RIDM) (2), whose hypothesis is the random mixture of mobile species and the presence of structurally different sites of occupation for each ion. To study the validity of the model, the random mixture of ions will be frustrated by manipulating the structural properties of the matrix or by the introduction of a third mobile specie, with high Colombian potential. Therefore, a vitreous system with intense MIE (Li-Cs metaphosphate) was disturbed by the addition of a third non-mobile specie (Sr), looking for conditions to inhibit MIE associated with the mixture of alkaline ions, according to the composition $(50 - x - y)\text{Cs}_2\text{O} - x\text{Li}_2\text{O} - y\text{SrO} - 50\text{P}_2\text{O}_5$, varying x from 0 to 37.5 mol% and y from 0 to 40 mol%. A second vitreous system, without MIE (Li-Ca metaphosphate), had its vitreous matrix distorted by leaving the metaphosphate composition for the polyphosphate, according to the composition $x\text{Li}_2\text{O} - y\text{CaO} - (50 - x - y)\text{P}_2\text{O}_5$, varying x from 20 to 60 mol% and y from 0 to 30 mol%. With solid-state NMR, we measured average isotropic chemical shifts and line widths of the nucleus ^{31}P , ^7Li and ^{133}Cs as a function of their ionic density. For all Li-Cs and Li-Ca ratios, we observed linear behaviors, indicating that variations of any of the ions do not affect the dilution of the others, indicative of the random mixture of ions, in accordance with the RIDM. In addition, through impedance spectroscopy and static NMR with variation on temperature, we show that MIE is still present after the addition of Sr, which acts as blocking ion in the diffusion of Li and Cs, decreasing the conductivity globally.

Palavras-chave: NMR. Ionic glasses. Phosphorus glasses. Mixed ions effect.**Agência de fomento:** CNPq (140808/2020-5)**Referências:**

1 ISARD, J. O. The mixed alkali effect in glass. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 1, n. 3, p. 235-261, 1969.

2 SWENSON, J. *et al.* Random ion distribution model: a structural approach to the mixed-alkali effect in glasses. **Physical Review B**, v. 63, n. 13, p. 132202-1-132202-4, 2001.

PG170

Caracterização de enzimas ThiL de bactérias gram-negativas

NASCIMENTO, Alessandro¹; FARRO, Erick Giancarlo Suclupe¹

esuclupef@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na atualidade a resistência aos antibióticos é um problema que forma parte de global e urgente. A estimativa pela OMS diz que, em 30 anos, um aproximado de 10 milhões de mortes anuais em decorrência direta de infecções causadas por organismos resistentes a antibióticos. O problema é agravado pelo número limitado de vias/alvos sobre os quais agem os antibióticos atualmente disponíveis. De acordo com Walsh e Wencevitz (1), os antibióticos atualmente existentes são restritos a apenas cinco alvos/vias de ação. Desta forma, somam-se (i) a difusão de cepas resistentes, (ii) o número decrescente de novos antibióticos ou de moléculas inovadoras, e (iii) o número reduzido de alvos sobre os quais os antibióticos agem. Recentemente, a enzima tiamina fosfato quinase (ThiL) foi validada como um novo alvo para o desenvolvimento de antibióticos contra *Pseudomonas aeruginosa*. (2) Enzima que faz parte da via de síntese de tiamina (vit-B1) presente em muitos microrganismos e em plantas, mas ausente em mamíferos. Recentemente foi avaliada a deleção da enzima ThiL que causa defeitos de crescimento em *P. aeruginosa* e reduz a virulência da bactéria. (3) Neste projeto, propomos um estudo da relação estrutura-função sobre a enzima ThiL em organismos importantes do ponto de vista clínico, dentre os quais *Klebsiella pneumoniae* e *Escherichia coli*. Para esta finalidade os genes para as enzimas ThiL de *K. pneumoniae* (KpThiL) e *E. coli* (EcoThiL) foram sintetizados com otimização de códons para a expressão bacteriana e a metodologia empregada envolve a expressão e purificação por afinidade ao metal e por exclusão por tamanho. Experimentos iniciais de DSF (Differential Scanning Fluorimetry) serão realizados para mapear a interação das enzimas com os substratos visando experimentos de co-cristalização. Os primeiros resultados indicam que as proteínas de KpThiL e EcoThiL são bem expressas em *E. coli* Rosetta, e são purificadas na fração solúvel, com um rendimento médio de 12 e 9 mg/mL respectivamente. Os ensaios com o DSF variando pH e concentração de NaCl sugeriram uma estabilidade máxima em um pH 8.0 e em uma concentração de 700 mM de sal. A mesma técnica também revelou o aumento da estabilidade térmica na presença de Mg²⁺ e ADP. Foram obtidos cristais de ThiL de Kp, obtendo um conjunto de dados de difração até 1,53 Å, já esta em fase de análises. Com este resultado inicial pode se iniciar testes de inibição por docking molecular.

Palavras-chave: Estrutura-e-função-de-proteínas. *Klebsiella pneumoniae*. ThiL.

Agência de fomento: FAPESP (2022/04298-3)

Referências:

1 CENTERS FOR DISEASE CONTROL AND PREVENTION. **Antibiotic resistance threats in the United States, 2019**. Atlanta, GA: U.S. Department of Health and Human Services - CDC, 2019. DOI: 10.15620/cdc:82532.

2 WALSH, C.T.; WENCEWICZ, T.A. Prospects for new antibiotics: a molecule-centered perspective. **Journal of Antibiotics**, v. 67, p. 7-22, 2014. DOI: 10.1038/ja.2013.49.

3 KIM, H. J. *et al.* The ThiL enzyme is a valid antibacterial target essential for both thiamine biosynthesis and salvage pathways in *Pseudomonas aeruginosa*. **Journal of Biological Chemistry**, v. 295, n. 29, p. 10081-10091, 2020. DOI: 10.1074/jbc.ra120.013295.

PG171

Investigation of the mode of action underlying brussonol's antiplasmodial activity

BARBOSA, Camila de Souza¹; MALUF, Sarah El Chamy¹; AHMAD, Anees²; BURTOLOSO, Antonio³; DUTRA, Marcos Leoni Gazarini⁴; LEHANE, Adele⁵; AGUIAR, Anna Caroline Campos⁴; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho¹

camilasbarbosa@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Química - UNICAMP; ³Instituto de Química de São Carlos - USP; ⁴Instituto de Saúde e Sociedade - UNIFESP; ⁵Australian National University - ANU

Malaria is an infectious disease that affects millions of people worldwide, mainly in developing countries. According to the World Health Organization (WHO), it was estimated that 241 million cases were responsible for approximately 627 thousand deaths globally in 2020. During the coronavirus disease (COVID-19) pandemic, WHO and partners collaboratively work to avoid service disruptions, so many campaigns to prevent and control this disease were completed.(1) Despite these efforts, the increase in malaria cases and malaria incidence was associated with the disruption of the services, thereby highlighting the importance of surveillance to tailor rapid responses to these changes. Malaria is a complex disease to eliminate and eradicate. Because of that, changes in how new antimalarial drugs are discovered and developed have been made. Currently, the antimalarial research is focused on discovering active molecules against resistant parasite strains, including parasites with reduced susceptibility to artemisinin, which are a great concern in the WHO African Region. Moreover, molecules capable of breaking the cycle of disease transmission are prioritized, which corresponds to compounds targeting parasite gametocytes (TCP-5), the insect vector (TCP-6), and active against hypnozoites (TCP-3).(2) Historically, natural products (NP) have been an attractive source of molecules for drug discovery. According to Newman and Cragg, from January 1981 to September 2019, over 68% of all small molecule approved drugs, and specifically, 60% of antiparasitic drugs, including antimalarial agents, were directly or indirectly derived from NPs. Plants are rich sources of new chemical scaffolds due to the development of molecules to fight off animal and environmental attacks. Examples of successful antimalarial agents inspired on plant metabolites are quinine and artemisinin. The icetexanes diterpenoids are a family of NPs that have been isolated from different terrestrial plants with diverse biological activities. These compounds have a 6-7-6 tricyclic framework, which is a key feature of the icetexane skeleton. In addition, the wide degree of oxygenation and oxidation in each ring of these compounds leads to diverse structures and biological activity.(3) In this research project, we investigated brussonol and synthetic derivatives as *P. falciparum* growth inhibitors. In this sense, we conducted extensive biological profiling to assess the antiplasmodial properties of brussonol that indicated the natural compound as a new antiplasmodial lead candidate.

Palavras-chave: Antimalarial activity. Brussonol. Mode of action.

Agência de fomento: CAPES (88887.369957/2019-00. 88887.715901/2022-00)

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World malaria report 2021**. Geneva: WHO, 2021.
- 2 FORTE, B. *et al.* Prioritization of molecular targets for antimalarial drug discovery. **ACS Infectious Diseases**, v. 7, n. 10, p. 2764-2776, 2021.
- 3 SIMMONS, E. M.; SARPONG, R. Structure, biosynthetic relationships and chemical synthesis of the icetexane diterpenoids. **Natural Product Reports**, v. 26, n. 9, p. 1195-1217, 2009.

PG172

Estudos estruturais de circovirus suíno: que regiões alvo são promissoras?

GARRATT, Richard Charles¹; ROCHA, Tamiris de Souza¹; THIEMANN, Otavio Henrique¹

tamiris.roc@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os circovírus suínos (*Porcine Circovirus* - PCV. são os menores vírus de DNA de fita simples pertencentes à família *Circoviridae*. Há quatro espécies conhecidas (PCV1 a PCV4), sendo que o PCV2 é o mais conhecido por ser o causador da circovirose suína. (1) Essa família de vírus tem ganhado cada vez mais importância e atenção na suinocultura, principalmente devido ao aumento do número de variantes conhecidas e novos dados que relatam sua ocorrência em outras espécies e em uma variedade maior de organismos, inclusive no ser humano. (2) Este trabalho tem como objetivo estudar as estruturas de PCV1, 3 e 4 para identificar possíveis regiões alvo (epítomos) que podem ser facilitadoras da identificação e/ou imunização de animais portadores do vírus. Isso será feito por meio de análises comparativas entre si e com a literatura de PCV2. (3) Para tanto, simulamos suas estruturas unitárias usando o AlphaFold e a forma de capsídeo viral (*Virus Like Particle* - VLP. usando o Modeller, *in silico*. refinando cada construção adequadamente. Já *in vitro*. expressamos heterologicamente cada alvo em *Escherichia coli* Rosetta transformada com o conjunto TaKaRa de plasmídeos (chamada de GRO-I) para síntese de chaperonas capazes de melhorar o enovelamento e a solubilidade da proteína-alvo. Em seguida, purificamos cada alvo por meio de técnicas cromatográficas de troca catiônica e exclusão molecular. Estudamos os alvos biofisicamente e enviamos para análise microscópica. Nossos resultados indicam que a região N-terminal destes alvos pode apresentar uma função importante para a formação do VLP, mas ao mesmo tempo dificulta a síntese das proteínas-alvo. Isso representa um impasse em caso de produção em escala, uma vez que em cepa bacteriana, não observamos expressão na presença desta região. Estamos realizando experimentos complementares para responder melhor a essas perguntas e esperamos obter mais informações sobre os epítomos e a função da região N-terminal a partir dos resultados de microscopia.

Palavras-chave: Circovirus suíno. Epítomos. AlphaFold.

Agência de fomento: CAPES (PROEX 88887.670916/2022-00)

Referências:

- 1 KROEGER, M.; TEMEEYASEN, G.; PIÑEYRO, P. Five years of porcine circovirus 3: what have we learned about the clinical disease, immune pathogenesis, and diagnosis. **Virus Research**, v. 314, p. 198764-1-198764-15, June 2022. DOI: 10.1016/j.virusres.2022.198764.
- 2 HOU, C.-Y. *et al.* Phylogenetic analysis of porcine circovirus 4 in Henan Province of China: a retrospective study from 2011 to 2021. **Transboundary And Emerging Diseases**, v. 69, n. 4, p. 1890-1901, June 2021. DOI: 10.1111/tbed.14172.

3 DHINDWAL, S.; FENG, S.; KHAYAT, R. The arginines in the n-terminus of the porcine circovirus 2 virus-like particles are responsible for disrupting the membranes at neutral and acidic pH. **Journal of Molecular Biology**, v. 431, n. 17, p. 3261-3274, Aug. 2019. DOI: 10.1016/j.jmb.2019.05.044.

PG173

Optimal processes measurements in a dynamically modulated optical tweezers system

MARTINS, Thalyta Tavares¹; KAMIZAKI, Lucas Prado²; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹

thalyta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

This study investigates optimal protocols in the mesoscopic regime, focusing on processes designed to minimize dissipated energy. Our approach involves the use of dynamically modulated optical tweezers. Specifically, we explore the time-dependent stiffness control of the trap, as proposed by Schmiedl and Seifert (1) and our group (2), and analyze the effects of various control parameters, such as the amplitude of modulation and switching time. By comparing the measured stochastic work distributions of the optimal protocols with linear (suboptimal) ones, we have obtained preliminary results that confirm the advantage of optimal protocols. (3) These results demonstrate that the average work of optimal protocols is consistently lower than linear protocols in all the parameters studied.

Palavras-chave: Optical tweezers. Optimal protocols. Stochastic Thermodynamics.

Agência de fomento: CAPES (88887.370240/2019-00)

Referências:

- 1 SCHMIEDL, T.; SEIFERT, U. Optimal finite-time processes in stochastic thermodynamics. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 10, p. 108301-1-108301-4, Mar. 2007.
- 2 KAMIZAKI, L. P.; BONANÇA, M. V. S.; MUNIZ, S. R. Performance of optimal linear-response processes in driven Brownian motion far from equilibrium. **Physical Review E**, v. 106, n. 6, p. 064123-1-064123-12, Dec. 2022.
- 3 MARTINS, T. T.; KAMIZAKI, L. P.; MUNIZ, S. R. **Thermodynamic measurement of non-equilibrium stochastic processes in optical tweezers.** 2022. DOI: 10.48550/arXiv.2209.05606.

PG174

Caracterização de minerais brasileiros por múltiplas técnicas estruturais e espectroscópicas

ANDRADE, Marcelo Barbosa de¹; ATENCIO, Daniel²; LOPES, Gerson Anderson de Carvalho¹

g.anderson@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Instituto de Geociências - USP

Os minerais são importantes, seja por suas estruturas cristalinas, suas composições químicas e pelas propriedades que os tornam tecnologicamente relevantes. O Brasil possui uma das maiores reservas minerais do planeta sendo um dos maiores exportadores de minério da atualidade, entretanto, as informações acerca das espécies minerais tipicamente brasileiras são escassas, contando somente com 76 espécies minerais descritas. (1) A pesquisa sobre os minerais brasileiros tem ampla potencial tanto para fortalecer as indústrias nacionais como tornar o Brasil mais competitivo internacionalmente. Esta pesquisa, portanto, visa contribuir com os objetivos do Centro de Caracterização de Espécies Minerais (CCEM), um projeto iniciado em parceria com grupo de Cristalografia do IFSC e que já caracterizou mais de uma dezena de novos minerais. As amostras são adquiridas através da colaboração de nosso grupo com museus, colecionadores, mineradoras e centros de pesquisa em geociências nacionais e internacionais e que já renderam publicações importantes. (2) A caracterização mineral ocorre pela aplicação de um conjunto de técnicas analíticas, como por exemplo a difração de raios X de monocristal e pó, fluorescência de raios X, espectroscopia Raman e no Infravermelho, análises térmicas como TGA e DSC e Microscopia eletrônica de varredura. Foram adquiridos, cinco conjuntos de amostras de minerais brasileiros, quatro do Estado do Amapá (3) e um do Estado de Minas Gerais, ligados a problemáticas diversas, mas que, em todos os casos, dependiam da caracterização. Durante o desenvolvimento desse projeto de doutorado abordou-se o estudo de modificações químicas superficiais em minério de caulim do Estado do Amapá; a caracterização de rejeito de caulim gerado industrialmente, a fim de buscar aplicações tecnológicas para este material; a caracterização de argila vermelha e cinzas de carapê da comunidade de Maruanum, no Estado do Amapá, visando elucidar problemáticas ligadas à antropologia; as análises de cerâmicas arqueológicas indígenas amazônicas, particularmente do Sítio Ilha Mirim, em Macapá-AP, Brasil; e a caracterização de amostras de minerais do grupo da romeíta brasileiros obtidos da cidade de Ouro Preto-MG, Brasil, com o intuito de determinar uma nova espécie ou ocorrência mineral.

Palavras-chave: Mineralogia. Difração de raios-X. Espectroscopia Raman.

Agência de fomento: FAPESP (13/03487-8, 19/23498-0)

Referências:

1 ATENCIO, D. **Type mineralogy of Brazil**: a book in progress. São Paulo: Universidade de São Paulo, Instituto de Geociências, 2020. 662 p.

2 LOPES, G. A. C. *et al.* Roméite-group minerals review: new crystal chemical and Raman data of

fluorcalcioroméite and hydroxycalcioroméite. **Minerals**, v. 11, n. 12, p. 1409-1-1409-19, 2021.

3 OLIVEIRA, M. J. (org.). **Diagnóstico do setor mineral do Estado do Amapá**. Macapá: Instituto de Pesquisas Científicas e Tecnológicas do Estado do Amapá, 2010. 148 p.

PG175

Evolução dos observáveis de um fluido quântico turbulento

MARINO, Áttis Vinícius Martines¹; MADEIRA, Lucas¹; CIDRIM, André²; SANTOS, Francisco Ednilson Alves dos²; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

attis.marino@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP; ²Departamento de Física - UFSCar

A partir de uma simulação computacional de um Condensado de Bose-Einstein (BEC) aprisionado por um potencial harmônico, contendo inicialmente um par de vórtices anti-paralelos duplamente carregados (1), extraiu-se a evolução temporal de uma série de observáveis de interesse. Esses observáveis ajudam a delinear um entendimento mais completo à respeito da evolução do sistema nessas condições, como o surgimento de um regime turbulento excitado pela interação dos vórtices quânticos. A análise da evolução da densidade de momentos e do espectro de energia mostra que a partir de um determinado instante, se estabelece um regime de turbulência caracterizado pela presença de cascatas de energia e de partículas, evidenciadas pela presença de regiões do espectro que obedecem à leis de potência de escalas conhecidas. O regime de turbulência ultraquântico de Vinen, observado em experimentos realizados em hélio líquido e característico de superfluidos, foi detectado na simulação como resultado da interação dos vórtices. Através da análise direcional das densidades de momentos, nos quais comparam-se os espectros limitados a direções e ângulos sólidos específicos, mostra-se que a isotropia da densidade de momentos é atingida assim que o regime turbulento se inicia, à despeito da anisotropia inicial da geometria do sistema. Além disso, realizando-se uma separação dos espectros de energia cinética em suas componentes rotacionais e compressivas, observa-se que a evolução do sistema desencadeia o transporte de energia compressiva para a rotacional. Extraíndo-se da simulação os fluxos de energia e partículas através das classes de momentos (2), obtém-se um comportamento oscilatório característico do modo de respiração do sistema. Em particular, o fluxo de partículas apresenta uma região positiva e praticamente constante no intervalo de momentos no qual se identifica o regime de turbulência de Vinen, indicando a presença de uma cascata direta de partículas.

Palavras-chave: Fluidos quânticos. Turbulência quântica. Condensados de Bose-Einstein.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 CIDRIM, A. *et al.* Vinen turbulence via the decay of multi-charged vortices in trapped atomic Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 96, n. 2, p. 023617-1-023617-10, Aug. 2017.
- 2 MARINO, Á. V. M. *et al.* Momentum distribution of Vinen turbulence in trapped atomic Bose-Einstein condensates. **European Physical Journal Special Topics**, v. 230, n. 4, p. 809-812, June 2021.

PG176

Avaliação e sincronia de osciladores utilizando diferentes meios e métodos

DAMACENO, Luiz Paulo¹; MAGALHÃES, Daniel Varela¹

ldamaceno@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O sincronismo de tempo e frequência entre osciladores é crucial para troca de informações de forma rápida e confiável. (1) Além da sincronização de tempo para nossos relógios, que é importante para manter não somente a cronologia das informações, também temos que nos atentar para a sincronia e estabilidade de frequência. Uma fonte ou referência local de frequência mal sintonizada e instável, que fornece sinais para uso em relógios e também para geração de sinais de rádio, pode gerar diversos problemas em comunicações como perda de dados, ruídos de diferentes níveis no espectro de radiofrequência e lentidão em sistemas que precisem de altas velocidades de processamento. Variados protocolos de comunicação e, coincidentemente alguns dos principais, dependem de boa sincronia de tempo e frequência para seu correto funcionamento. Desde a implementação das redes 3G, e hoje com LTE e 5G, a sincronização de tempo e frequência garantindo estabilidade e remoção de deslocamentos de frequência é extremamente importante. Se observarmos bem, em toda ERB (Estação de Rádio Base) de redes móveis veremos uma pequena antena para aquisição de dados GNSS. (2) Além de oferecer informações geográficas da antena aos dispositivos móveis, esses receptores sincronizam os relógios e circuitos de síntese de frequência dos instrumentos e equipamentos de telecomunicações ali presentes. Embora a frequência na qual um oscilador a cristal opere seja usualmente estável, não é possível garantir que os cristais nos diferentes computadores funcionem na mesma frequência. Na prática, quando um sistema possui “n” computadores, todos os “n” cristais estarão em taxas ligeiramente diferentes, levando os relógios a ficarem gradualmente fora de sincronismo. Esta diferença em valores de tempo é chamada *clock skew*. Como consequência deste *clock skew*, programas que se baseiam no tempo associado a um arquivo, objeto ou processo podem falhar, caso precisem atuar simultaneamente e em conjunto. Vemos então que temos grande necessidade de métodos de sincronização de tempo e frequência, tanto no armazenamento de informações como na troca de dados entre servidores, criptografia, etc. Hoje, os sinais de transmissão e recepção por rádio, cabo, ou fibra demandam sincronia temporal e de frequência para a correta demodulação e modulação dos mesmos, devido ao grande volume de dados em um curto espaço de tempo. (3)

Palavras-chave: Osciladores. Sincronia. Satélite.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 SANTOS, D. P. **Sincronismo de tempo e frequência em receptores OFDM**. 133 p. 2022. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2022.

2 CORDEIRO, A. R. **Localização geográfica através de aparelho celular**. [20-]. Disponível em: <http://www.eletrica.ufpr.br/p/arquivostccs/39.pdf>. Acesso em: 24 jul. 2023.

3 MILLS, D. L. Internet time synchronization: the network time protocol. **IEEE Transactions Communications**, v. 39, n. 10, p. 1482-1493, Oct. 1991

PG177

Avanços na confiança e precisão dos padrões de frequência com átomos frios: implicações para metrologia

MAGALHÃES, Daniel Varela¹; MASCARIN, Richard Parciasepe¹

rickmascarin@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O papel fundamental dos padrões de frequência baseados em átomos frios na sociedade atual é inegável. (1) Como parte de um grupo de pesquisa comprometido em desenvolver sistemas atômicos cada vez mais confiáveis, temos dedicado vários anos ao aprimoramento da infraestrutura de laboratórios para referências de tempo e frequência. (2) Nosso foco principal tem sido nos padrões de átomos frios, os quais são desenvolvidos utilizando instrumentação óptica e eletrônica de última geração. (3) O objetivo central do nosso projeto é avaliar e refinar as fontes de ruído presentes nos lasers utilizados para manipulação e avaliação dos átomos frios, os quais desempenham o papel crucial de referência de frequência na região de micro-ondas. Reconhecemos que o desempenho alcançado está diretamente vinculado à largura de linha das fontes de luz utilizadas, influenciando aspectos como capacidade de resfriamento, bombeamento óptico e relação sinal-ruído durante a detecção. Portanto, é essencial determinar os tipos, níveis e pesos das diferentes fontes de ruído nos lasers dos nossos sistemas, o que permitirá estabelecer novos limites operacionais para nossas referências de frequência. Através dessa pesquisa, buscamos avançar significativamente na confiabilidade e precisão dos padrões de frequência baseados em átomos frios, contribuindo assim para diversas aplicações em áreas como metrologia, comunicações e sistemas de navegação.

Palavras-chave: Relógio atômico. Átomos frios. Gerenciamento de ruído.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 BAGNATO, V. S.; ZILIO, S. C. Ultimate temperature for laser cooling of two-level neutral atoms. *Revista Brasileira de Física*, v. 19, n. 1, p. 127-136, 1989.
- 2 MAGALHÃES, D. V. **Desenvolvimento de uma fountain atômica para utilização como padrão primário de tempo**. 2004. 166 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004. DOI: 10.11606/T.76.2004.tde-17012008-161241.
- 3 MULLER, S. T. **Estudo da viabilidade de construção de um padrão de frequência atômico baseado em uma nuvem de átomos frios em expansão**. 2005. 87 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2005. DOI: 10.11606/D.76.2005.tde-24062008-090738.

PG178

Identificação de espécies de madeira baseado em fusão de características em três planos anatômicos

RIBAS, Lucas Correia¹; SCABINI, Leonardo²; ZIELINSKI, Kallil²; BRUNO, Odemir Martinez²

kallil@usp.br

¹Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas - UNESP; ²Instituto de Física de São Carlos - USP

Este estudo foca no desafio significativo na área de conservação florestal: a identificação de espécies de madeira utilizando métodos de aprendizado de máquina e processamento de imagens. Este desafio é particularmente importante na África, onde a classificação de espécies de madeira é uma necessidade premente, dada a diversidade e a demanda por recursos madeiros na região. Para abordar essa lacuna, nossa pesquisa foi conduzida em espécies comerciais de madeira da República Democrática do Congo (RDC) usando a coleção de madeira do Museu Real da África Central da Bélgica (RMCA). Foi constatado que as características de textura extraídas das seções transversais microscópicas têm um potencial discriminativo na classificação de madeira. Neste artigo, buscamos avançar o campo de identificação de espécies de madeira utilizando um método de *transfer learning* em um conjunto de dados multivisão. Este conjunto de dados, proposto por Silva *et al.* (1), abrange três seções de madeira: transversal, tangencial e radial, contendo 805 imagens que representam 77 espécies distintas de madeira. Através desta base, avaliamos nossos métodos propostos de aprendizado de máquina para a classificação de espécies de madeira. Para aumentar a precisão obtida por Silva *et al.* (1), propomos duas abordagens de *transfer learning* que aproveitam o poder dos modelos pré-treinados e as técnicas de aprendizado avançado. Em particular, utilizamos duas metodologias para extração de características texturais das imagens de madeiras da base de dados. Primeiro utilizamos um simples *Global Average Pooling* (GAP) na última camada do modelo pré-treinado e também método RADAM proposto por Scabini *et al.* (2), que demonstrou ser eficaz na extração de características de imagens com propriedades texturais, tendo alcançado o estado da arte em várias bases de dados de textura. Diferente do GAP, RADAM analisa diversas camadas de pesos da rede neural para fazer o pooling. Ao analisar o desempenho desses métodos em diferentes seções anatômicas, sendo elas transversal, tangencial e longitudinal, observamos uma melhora notável em relação às abordagens anteriores. Notavelmente, as seções transversais e tangenciais demonstraram um poder discriminante superior em comparação com a seção radial, reforçando a ideia de que diferentes aspectos da estrutura da madeira podem fornecer informações valiosas para a identificação de espécies. Além disso, a combinação das três seções mostrou-se eficaz, oferecendo os melhores resultados em termos de acurácia de classificação. Entre os dois métodos propostos neste estudo, RADAM demonstrou consistentemente desempenho superior em diferentes bases de dados, seções anatômicas e estratégias de fusão de características. Isso destaca a robustez do RADAM em lidar com diversas condições e reforça seu potencial como uma ferramenta eficaz não só para reconhecimento de textura, mas também para identificação de espécies de madeira. Além disso, nossas descobertas podem potencialmente contribuir para a automação da identificação de espécies de madeira, reduzindo a dependência de conhecimento especializado e possibilitando abordagens mais eficientes e escaláveis. Isso é particularmente relevante no contexto de monitoramento e regulação da cadeia de suprimentos de madeira, onde a capacidade de identificar rapidamente e com precisão as

espécies de madeira pode facilitar as intervenções e promover práticas responsáveis.

Palavras-chave: Identificação de espécies de madeira. Aprendizado de Transferência. Análise de textura em imagens.

Agência de fomento: FAPESP (2022/03668-1)

Referências:

1 SILVA, N. R. *et al.* Ver-waeren, improved wood species identification based on multi-view imagery of the three anatomical planes. **Plant Methods**, v. 18, n. 1, p. 79-1-79-17, Feb. 2022.

2 SCABINI, L. *et al.* RADAM: texture recognition through randomized aggregated encoding of deep activation maps. **Pattern Recognition**, v. 143, p. 109802-1-109802-13, Nov. 2023.

Índice de Autores

A		
ABBAS, Z.	311, 324	
AFONSO, M.	65	
AFONSO, R.	92	
AGUIAR, A. C.	106	
AGUIAR, A. C. C.	339	
AHMAD, A.	339	
AKHMANOVA, A.	248	
ALVARENGA, L. N. C.	205	
ALVES JUNIOR, E. L.	105	
ALVES JUNIOR, E. S. A.	115	
ALVES, A. H. R.	289	
ALVES, F.	331	
ALVES, R.	175	
AMBROSIO, A. L. B.	93, 208, 245, 261	
ANDRADE, E. C.	53	
ANDRADE, L. N. S.	332	
ANDRADE, M. B.	125, 344	
ANDRADE, M. J. D.	144	
ANDRICOPULO, A. D.	39, 65, 167, 248	
ANTUNES, C. A.	253	
APARECIDA, C. A.	215	
ARAUJO, A.	151	
ARAUJO, A. P. U.	324	
ARAUJO, H. S.	97	
ARAUJO, J. M. R.	193	
ARAÚJO, A. P. U.	29, 36, 137	
ARAÚJO, E. A.	283	
ARAÚJO, Í. M.	230	
ARGENTIN, M. N.	54	
ARMIJOS, M. A. M.	50, 199	
ARRUDA, S. S.	271	
ATENCIO, D.	344	
ATTIE, J. A. G.	239	
AYALA, E. T. P.	67, 145	
AZEVEDO, E. R.	56, 71, 74, 197	
B		
BACHELARD, R.	156	
BAGNATO, V. S.	50, 51, 103, 158, 199, 210, 217, 233, 235, 243, 247, 253, 255, 257, 271, 290, 307, 315, 319, 331, 346	
BALTAZAR, M. F. M.	110	
BARBOSA, C. S.	108, 339	
BARBOSA, L. V. S.	38	
BARBOSA, M. G.	116	
BARCOTO, M. O.	71	
BARONI, A. C. M.	195	
BARRIOS, N. L.	69	
BEJAR, D. S. L.	315	
BELLINI, B. S.	250	
BERETA, S. J.	287	
BERGAMASCHI, T. T.	123	
BERLINCK, R. G. S.	108	
BERNARDES, E. S.	123	
BERNARDI, J. C.	221	
BICEGO, J. R. P.	75	
BISTAFFA, M. J.	219	
BLANCO, K. C.	210, 214, 217	
BOITO, D.	264	
BOITO, D. R.	212	
BONAGAMBA, T.	41	
BONAGAMBA, T. J.	282	
BONATTO, V.	106	
BONI, L.	113	
BORGES, B. V.	96	
BORGES, N. M. M.	108	
BOSSOLAN, N. R. S.	294	
BOTASSIO, Y. G.	160	
BRADTMÜELLER, H.	128	
BRAGA, A. V. A. M.	262	
BRIHAYE, Y.	252	
BRUNO, O. M.	141, 185, 263, 280, 300, 350	

BUENO, L. G. C.	57
BUOZZI, M. T.	162
BURTOLOSO, A.	339
BUZZÁ, H. H.	202, 271, 307

C

CABREJOS, D. A. L.	137, 260
CALDERÓN, G. L.	276
CAMARGO, G. M.	191
CAMARGO, I. L. B. C.	54
CAMPOS, G. O.	131
CAMPOS, N.	41
CANDIDO, V. T.	54
CAPETTI, C. C. M.	180
CAPOBIANCO, R. A.	252
CAPUZZO, L. B.	278
CARDOSO, M.	328
CARDOSO, M. R.	170
CARDOSO, V. M. O.	160, 219
CARVALHO, I. S.	331
CARVALHO, M. M. C. E.	56
CASTILHO, P. C. M.	32, 86, 319
CASTRO NETO, J. C. ..	72, 83, 162, 179, 187
CAVINI, I. A.	151, 324
CAVINI, Í. A.	29
CERRI, R.	289
CHACCA, C. W. T.	319
CHAVES, E. G.	74
CHEN, J.	202, 307
CIDRIM, A.	346
CIOL, H.	324
CIPRIANO, L.	135, 177
COCCA, L. H. Z.	115
COELHO, F.	248
COELHO, F. A. S.	39
CORREIA, D. S.	173
CORRER, G. I.	127, 142
CORRÊA, B. C.	214
COSTA, C. S.	233
COSTA, G. F.	44
COSTA, L. F.	84
COSTA, M. S. F.	110
COURTEILLE, P. W.	166, 236
CROCE, J. N.	164
CUCCHIERI, A.	224
CUMPALLI, A. A.	253
CUNHA, P. H. C.	86

D

D'AMICO, I.	85
DAMACENO, L. P.	347
DE BONI, L.	115, 131, 147, 149, 288
DELPHITO, L.	208
DERRICO, F. F.	46
DIAS, L. D.	297
DIAS, S. M. G.	261
DOLCI, I.	135, 177
DOMINGUES, A. V.	259
DOMINGUES, G. C.	53
DOMINGUES, G. S.	84
DONATO, M. H. F.	194
DOURADO, L. A.	154
DRINKO, A.	127, 142
DUARTE, M.	89
DUTRA, M. L. G.	339
DÖRING, T. H.	167

E

ECKERT, H.	81, 128
ELLENA, J.	101
ELLENA, J. A.	122
ELLENA, M. N.	93

F

FARIA, C. M. G.	233
FARIA, G.	190
FARIA, G. C.	285, 296
FARIA, R. M.	285
FARIAS, K. M.	319
FARRO, E. G. S.	337
FAUSTINO, M. A.	288
FERNANDES, R. S.	135, 177, 237
FERNÁNDEZ, D. R.	170, 328
FERNÁNDEZ, L. A. V.	324
FERNÁNDEZ, V. C.	93
FERREIRA, A. G. A.	77
FERREIRA, C. H. G.	189
FERREIRA, J. F.	294
FERREIRA, L. A.	49, 184
FERREIRA, L. L. G.	167
FERREIRA, M. J.	28, 335
FERREIRA, N. N.	110
FERREIRA, P. C. A.	127, 142
FILGUEIRAS, J. G.	56, 197
FILHO, J. D. V.	290
FIRMINO, P. P.	101

FIUZA, L. G.	255
FLOREZ, Y. A.	285
FONTANARI, J. F.	35, 43, 47, 193, 320
FRANCO, T. F. S.	57
FRANCO-DIAZ, E. R.	284
FRANÇA, G. H.	166, 236
FREITAS, A.	283
FRITSCH, A.	199
FRITSCH, A. R.	50
FURTADO, A. A.	260
FURTADO, E. F.	280

G

GALVANI, P. B.	221
GARBUIO, M.	51, 158
GARCIA, G. H. M.	224
GARCIA, M.	322
GARCIA, R. H.	74, 197
GARCIA, R. H. S.	56, 71
GARCIA, R. Q.	147, 288
GARRATT, R. C.	36, 137, 260, 261, 311, 324, 341
GASPAR, P. M.	32, 319
GILER, A. G. D.	330
GODOY, A. S.	135, 177, 237, 292
GODOY, M. O.	266
GOENAGA, L.	290
GOETTEMS, E. I.	92
GOMES JUNIOR, F. G.	175
GOMES, N. D.	96
GOMES, Y. H. F.	81
GONÇALVES, P. J.	115
GONÇALVES, R. V.	45
GOULART, T. A. C.	108
GRIGORIEV, I.	248
GUIDO, R. C.	317
GUIDO, R. V. C.	106, 108, 195, 206, 266, 292, 339
GUIMARÃES, F. E. G.	111, 191, 200, 226, 274
GURGEL, L. V. A.	56

H

HABERMANN, G.	150
HAJJOU, H.	226
HARTMANN, B.	232, 252
HENN, E. A. L.	94, 239, 240
HERNÁNDEZ, L. J. E.	128
HONORATO, H. A.	74

I

ILÍDIO, P.	289
INACIO, A. C. C.	143
INADA, N.	290
INADA, N. M.	51, 134, 158, 235, 243, 255, 257, 271, 297
ISSA, M.	333
IYER, S.	248

J

JASINEVICIUS, G. O.	202, 307
JEREZ, Y. D. R.	236
JESUS, L. G. F.	257
JOAQUIM, D. T.	300
JUCOVSKI, A. G.	245
JURBERG, I. D.	108
JUSTINO, L. R.	91

K

KAMIZAKI, L. P.	343
KASSAB, G.	61, 307
KEISER, M.	206
KONDO, J. D. M.	96
KURACHI, C.	61, 111, 164, 202, 255, 257, 274, 290, 307
KWON, N.	307
KÜL, J. O.	48

L

LAISSENER, B. S.	179
LANG, R. G.	154
LAZARI, M. P.	74
LEAL JUNIOR, J. M.	169
LEGUIA, C. G.	93
LEHANE, A.	339
LEITE, A. E. T.	38
LEITE, C. M.	38, 69
LIMA, A. P.	74
LIMA, A. R.	51, 158
LIMA, I. A.	255, 257
LIMA, L. V.	57
LIMA, T. H. N.	210
LIMA, V. P. G.	326
LOPES, G. A. C.	344
LOPES, R. G.	243
LOURENÇO, Y. C.	77
LUGINIESKI, M.	296

M	
MACHADO, L. A.	103, 199
MACHADO, R. A. M.	261
MACHADO, T. R.	63, 139
MACÊDO-LIMA, M.	241
MADEIRA, L.	48, 103, 199, 241, 346
MAGALHÃES, D. V.	96, 347, 349
MAGNO, G. F.	189
MAIA, L. C.	56
MAIA, L. P.	118
MALAVAZZI, H.	184
MALUF, S. E. C.	195, 339
MAMANI, E. C.	151
MAMPRIM, J. G.	133
MANSUR, L. M.	264
MARASSI, A.	41, 175
MARASSI, A. G.	282
MARCASSA, L. G.	96, 105, 170, 328
MARCELINO, G. B. S.	45
MARCOLAN, J.	175
MARCOS, V. B.	60
MAREGA JUNIOR, E.	60
MAREGA JUNIOR, E.	276
MARIANO, M. S.	43
MARINO, Á. V. M.	346
MARQUES, M. J. A. M.	111
MARQUES, V. A. S.	268
MARTINELLI, L. P.	202, 307
MARTINEZ, V. J.	94
MARTINS, E. B.	247
MARTINS, F. C. P.	106
MARTINS, G. L.	184
MARTINS, T. T.	343
MARUCCI, N. B.	121
MASCARIN, R. P.	349
MASS, E. B.	65, 248
MAZUERA, A. M.	63
MEDEIROS, A. I.	243
MEDINA, I.	127, 142
MEIRING, J. C. M.	248
MELO, N. J.	134
MENDES, G. R.	106, 108, 195
MENDES, S. C.	56
MENDES, T. C. R.	112, 169
MENDONÇA, C. R.	121, 131
MENDONÇA, C. R.	33, 87, 113, 115, 143, 149, 268
MENDONÇA, D. C.	324
MENEZES, J. C. E.	44, 284
MENEZES, S. M. C.	74
MESSADDEQ, Y.	276
MEZZACAPPO, N. F.	235
MIRANDA, M.	200
MIRANDA, P. B.	75, 278
MIRANDA, R. R.	69
MISOGUTI, L.	119
MOMESSO, D. C.	223
MONTANARI, C. A.	106
MONTEIRO, G. N. A.	204
MORAZOTTI, N. A.	225
MORAZOTTI, N. A. C.	171
MOREIRA, N. A.	156
MORENO, N. S.	110
MORGUETTO, G. F.	28, 335
MORIYAMA, L. T.	99, 202, 326
MOTTA, O.	273
MOULIN, E.	270
MOUNIER, S.	226
MOURA, A. F.	329
MOURA, I. M. R.	106, 108, 195
MOUSSA, M. H. Y.	97, 228, 230
MOYSÉS, R. M.	119
MUNDO, T. L.	213
MUNIZ, J.	78
MUNIZ, S.	299
MUNIZ, S. R.	194, 205, 259, 332, 343
MUÑOZ, S. M.	93
MÜNDEL, V.	78
N	
NAPOLITANO, R.	225
NAPOLITANO, R. J.	171, 204, 273
NASCIMENTO, A.	337
NASCIMENTO, I. S.	139
NEVES, J. B.	80
NOGUEIRA, G. A.	212
NOGUEIRA, G. T.	83
NOGUEIRA, V.	206
NORONHA, A. R.	108
NOSKE, G. D.	135, 237
NUNES, P.	122
O	
ODA, Y. S.	187
OITICICA, P. R. A.	263

OLIVA, G.	135, 177, 237, 266, 313
OLIVEIRA JUNIOR, M.	31, 67
OLIVEIRA JUNIOR, O. N..	263
OLIVEIRA JUNIOR., O. N. O.	329
OLIVEIRA, A. O.	179
OLIVEIRA, A. S.	167
OLIVEIRA, C.	118
OLIVEIRA, C. E.	302
OLIVEIRA, G.	292
OLIVEIRA, G. R.	115
OLIVEIRA, J. E.	74
OLIVEIRA, J. R. T. S.	266, 313
OLIVEIRA, L. N.	85, 182
OROZCO, A. D. G.	199
OYAMA, Y. K.	31

P

PACÍFICO, L. G.	63
PAIVA, F. F.	46, 70, 129, 317
PALAMONI, O.	99
PATÍÑO, C. P. B.	233
PAULA, J. P. C.	57
PAULI, I. G.	304
PELLEGRINI, V. O. A.	180, 297
PELOSI, A.	113
PELOSI, A. G.	115
PENTEADO, P. H.	44, 284
PEPINO, V. M.	96
PEREIRA, H. D.	137, 260
PEREIRA, L. A.	282
PEREIRA, M. V. S.	58
PESSOA JUNIOR, C.	166
PESSOA JUNIOR, C. A.	236
PICOLI, F. D.	85
PIMENTA, J. V. A.	57
PINHEIRO, R. C.	108
PINTO JUNIOR, F. F.	200
PINTO, A. P. A.	324
PINTO, D. O. S.	127, 142, 189, 277, 306
PINTO, D. S.	92
PINTO, R. D.	250
PINTO, V. P.	83
POLIKARPOV, I.	180, 283, 297
PRATAVIEIRA, S.	67, 145, 215, 226, 253, 322, 331

Q

QUEIROZ, A. A. A. E.	125
---------------------------	-----

QUEIROZ, G. E. T.	317
QUITIBA, J. V. B.	110, 309

R

RAFAEL, L. D. D.	39, 65
RAIMUNDO, B. V. B.	243
RAMOS, M. E. M.	265
RAMPONI, T. C.	232
REIS, I.	270
REQUENA, M. B.	315
RIBAS, L. C.	263, 280, 350
RIBEIRO, L. V.	152
RIGO, C. F. S.	195
RITS, C. A.	36
RIVERA, V. A. G.	276
RIVERO JEREZ, Y. D.	166
ROCHA, T. S.	341
RODERO, C. F.	38, 58, 110
RODRIGUES, A.	71
RODRIGUES, N. E.	185
RUSSOWSKY, D.	65, 248

S

SADRAEIAN, M.	200
SALADINO, G. C. R.	137
SALCEDO, E. G. I.	319
SALDIVA, P. H. N.	226
SAMMARRO, K. J.	51, 158
SANCHES, M. A.	35
SANTARELLI, M. A. C.	80, 287
SANTARELLI, M. C.	103
SANTIAGO, P. H. O.	101, 122
SANTILLAN, J. A. V.	260, 261
SANTOS, B. N.	240
SANTOS, C. H. D.	113, 149
SANTOS, F. E. A.	346
SANTOS, G. G.	217
SANTOS, J. P. C.	141
SAPIO, C. A.	87
SCABINI, L.	350
SCABINI, L. F. S.	263
SCHNEIDER, J. F.	28, 335
SCIUTI, L. F.	113
SCULACCIO, S. A.	260
SENA, R.	70
SEPULCHRO, A. G. V.	297
SHARMA, R.	206
SILVA, A. H.	171, 225

SILVA, A. H. M. F. T.	74	TELLES, G. D.	199
SILVA, A. J. B.	306	TENDULINI, A. J. G.	72
SILVA, B. R.	313	THIEMANN, O.	333
SILVA, C. A.	49	THIEMANN, O. H.	289, 341
SILVA, C. C. P.	101, 122	TOMÉ, A. J. B.	61
SILVA, D. L.	115	TONHON, R. C. S.	112
SILVA, E. C.	114	TORRES, B. B. M.	190, 296
SILVA, G. D.	182	TORRES, M. L.	170, 328
SILVA, G. L. F.	57	TOVAR, J. S. D.	202, 226, 255
SILVA, J. A.	288	TRANZIL, V. T. R.	33
SILVA, L. F. A.	228	TREBBI, B.	197
SILVA, L. L.	50	TÓRTURA, H. A.	320
SILVA, L. R. G.	299		
SILVA, M. G. G.	27	U	
SILVA, R. M.	137	UNGARETTI, D.	57
SILVA, T. S.	39, 248		
SILVEIRA, P. M. M.	29	V	
SIPAHİ, G. M.	229, 302, 304	VACILOTTO, M. M.	297
SIQUEIRA, A. H.	229	VALENTE, D.	92
SIQUEIRA, C.	91	VALVERDE, J. V.	121, 131, 288
SOARES, J. G. S.	71	VALVERDE, J. V. P.	115
SOARES-PINTO, D.	150	VANZELLA, D. A. T.	116
SOLCIA, G.	46, 70, 129	VECCHI, M.	330
SOUSA, D. B.	132	VERA, C. L. R.	110
SOUSA, F. A. D.	111	VERAS, M. M.	226
SOUSA, M. S.	278	VIANA, A.	27, 91, 265
SOUZA FILHO, L. V.	118, 133, 213	VIANA, A. E. M.	132, 144, 223, 262, 270
SOUZA, G.	233, 274	VICENTE, M. L. F.	61, 226
SOUZA, G. E.	195	VIEIRA, B. F.	322
SOUZA, M.	51	VILELA, R. R. C.	63
SOUZA, M. O.	67	VIVAS, M. G.	149
SOUZA, M. S.	39, 65, 158, 248	VOLLET FILHO, J. D.	164
SOUZA, R. F. S.	190		
SOUZA, R. M. S.	108	W	
SOUZA, V.	89, 154, 330	WANDERLEY, A. B.	302
STRINGASCI, M. D.	271		
SUZUKI, I.	58	Y	
SUZUKI, Y.	129	YASUOKA, F. M. M.	83, 162
T		Z	
TAKEUTI, N. N. K.	139	ZAMBON, G. C.	277
TANNUS, A.	173	ZAMPRONIO, A. A. V.	47
TANNÚS, A.	175	ZAPATA, J. C. B.	329
TEIXEIRA, R. C.	236	ZHENG, G.	202, 307
TEIXEIRA, S. C. S.	74	ZIELINSKI, K.	350
		ZUCOLOTTO, V.	38, 58, 63, 69, 110, 114, 139, 160, 219, 221, 309

Apoio



IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos



1982 - 2022

40 ANOS

Patrocínio



Blucher

THORLABS



LAC
PRODUTOS LABORATORIAIS



FINE INSTRUMENT
TECHNOLOGY